ANALES

DE LA

SOCIEDAD CIENTIFICA ARGENTINA

DIRECTOR: JOSE S. GANDOLFO

JULIO-DICIEMBRE 1962 — ENTREGAS I - VI — TOMO CLXXIV

SUMARIO



BUENOS AIRES
AVDA. SANTA FE 1145

1962

SOCIEDAD CIENTIFICA ARGENTINA

ADVERTENCIA. — Los colaboradores de los Anales son personalmente responsables de la tesis sustentada en sus escritos. Los que deseen tirada aparte de 50 ejemplares de sus artículos, deben solicitarla por escrito. Art. 10 del Reglamento de los "ANALES" (modificado por la J. D. en su sesión de fecha 4 de Septiembre de 1941). Los escritos originales destinados a la Dirección de los "Anales", serán remitidos a la Gerencia de la Sociedad, Avenida Santa Fe 1145, a los efectos de registrar la fecha de entrega para luego enviarlos al señor Director.

Impreso en EDITORIAL DEL PLATA S. A. - Sarandí 844/48 - Capital

ANALES

DE LA

SOCIEDAD CIENTIFICA ARGENTINA

DIRECTOR: JOSE S. GANDOLFO

TOMO CLXXIV

BUENOS AIRES
AVDA. SANTA FE 1145

1962

CONTRIBUCION AL ESTUDIO DEL CONTENIDO DE INFORMACION DE ESTRUCTURAS QUIMICAS (*)

POR EL

DR. MAXIMO VALENTINUZZI Y EL ING. M. EUGENIO VALENTINUZZI

(Instituto Nacional de Microbiología, Ministerio de Asistencia Social y Salud Pública, Buenos Aires, Argentina.)

"Science begins when the meaning of the words is strictly delimited".

(*L. Brillouin*: Science and Information Theory. Academic Press. New York, 1956).

Resumen. — En este estudio se desarrolla un análisis de las estructuras químicas desde el punto de vista de la Teoría de la Información y se determina el valor de la energía necesaria para organizar un bit de información. Se toma como punto de partida un método dado por Morowitz; se lo adapta para calcular la información de especies químicas definidas (aldehidas, alholes, aminoácidos, hidratos de carbono, etc.) y se compara los resultados globales con los obtenidos mediante otros métodos (métodos de Linschitz, Branson y Dancoff-Quastler). Calcúlase la energía de formación de las substancias elegidas y se establece relaciones por cociente entre los valores de esta energía y la cantidad de información. Las más interesantes de estas relaciones son el cociente entre la entropía y la cantidad de información ($8{,}1 \times 10^{-26}$ [Kcal/°Kxbit]) y entre la energía de formación y la cantidad de información (10^{-12} [ergio/bit]). Se puede, así, afirmar que a un bit corresponde una determinada cantidad de entropía y, por lo tanto, de energía. Si se piensa que existe cuantificación, cabe deducir qué longitud de onda corresponde a esa energía, resultando valores dentro de la zona de radiación en que ocurre la fotosíntesis clorofiliana. Por otra parte, la entropía que corresponde a un bit permite estimar la información acumulada durante el crecimiento biológico y el calor eliminado por el sistema viviente en la unidad de tiempo (termograma) y durante determinados períodos. De este modo, la curva de crecimiento de los seres vivos prevé el comportamiento calorimétrico de éstos.

(*) De este estudio se hizo una exposición abreviada en el Instituto Nacional de Microbiología (Av. Vélez Sársfield 563, Buenos Aires), en la Reunión de Comunicaciones del 8 de Septiembre de 1960, con el título "Contenido de información de estructuras químicas y aplicaciones biocalorimétricas".

Resumo. — En ci tiu verko oni disvolvas analizon pri kemiaj strukturoj el vidpunkto de la Teorio de Informado kaj oni kalkulas la valoron de energio bezonata por organizi unu bit de informo. Oni prenas kiel bazon metodon verkitan de Morowitz kaj adaptas gin al kalkulado de informo de difinitaj kemiaj specoj (aldehidoj. alkoholoj, aminoacidoj, hidratoj de karbono k. t. p.) kaj oni komparas la tutecajn rezultojn al tiuj akiritaj pere de aliaj metodoj (metodoj de Linschitz, Branson kaj Dancoff-Quastler). Oni kalkulas la formigenergion de la elektitaj substancoj kaj starigas rilatojn kvocientajn inter la valoroj de tiu ci energio kaj la informokvanto. La plej interesaj el tiuj rilatoj estas la kvociento inter entropio kaj informokvanto ($8{,}1 \times 10^{26}$ [Kcal/°K×bit]) kaj inter energio kaj informokvanto (10^{12} [ergio/bit]) Oni povas tiamaniere firmdiri ke al unu bit korespondas determinita kvanto de entropio kaj, sekve, de energio. Se oni pensas ke ekzistas kvantumo, ci tio ebligas kalkuki kian ondlongecon korespondas al tiu energio, el kio rezultas valoroj interne al la zono de radiado en kiu okazas fotosintezo klorofila. Aliflanke, la entropio korespondanta al unu bit permesas taksi la informon amasigintan dum biologia kreskado kaj la varmon eliminitan de vivanta sistemo en ciu tempounueco (termogramo) kaj dum difinitaj periodoj. Per tiu ci vojo, la kreskkurbo de vivantajoj antaudiras la kalorimetran konduton de ci tiuj.

SUMARIO

I. — INTRODUCCION

Este estudio se propone analizar las estructuras químicas desde el punto de vista de la Teoría de la Información. Trata, también, de determinar el valor de la energía necesaria para organizar un bit de información, suponiendo, naturalmente, que tal valor existe y es constante para todas las substancias o, por lo menos, para grupos de especies químicas.

El trabajo se origina en un breve artículo de Harold J. Morowitz, "Some order-disorder considerations in living systems", publicado en el "Bulletin of Mathematical Biophysics", vol. 17, p. 81-86, 1955. En base a desarrollos puramente probabilísticos, este autor procede a una estimación aproximada del contenido de información de estrucutras moleculares biológicas. Valiéndose de la equivalencia formal

entre información y entropía termodinámica, Morowitz ha efectuado un cotejo numérico con datos calorimétricos obtenidos en microorganismos.

Conviene aclarar nuestra posición al respecto con el fin de evitar equívocos y confusiones. Existe una relación entre información y entropía termodinámica, de la cual nos ocupamos más adelante, pero, por el momento, no le atribuimos sentido físico al hecho de calcular la cantidad de información de la molécula de una substancia, y, luego, mediante la relación matemática con la entropía termodinámica, pretender obtener esta última. Sólo se obtiene un cambio de unidades: de [bit/mol] a [Kcal/°Kxmol]). Consideramos que esta transformación debe ser sometida a un análisis más profundo para asignarle algún significado físico.

Muchos lectores habrán de extrañarse, tal vez, ante el concepto de cantidad de información de un estructura. Trataremos de eliminar ese obstáculo.

La Teoría de la Información se originó en la Ingeniería de Comunicaciones, como estudio formal de los canales de comunicación y como respuesta a la pregunta "¿qué es lo que circula por un canal de comunicación?". En este sentido, que podríamos llamar clásico, la información es un ente dinámico que se desplaza desde una fuente de información, a través del canal, hasta el extremo receptor, que habrá de utilizar dicha información. Pero también es posible introducir un criterio distinto y menos conocido. Veámoslo en un ejemplo.

Sea un conjunto de soldados dispersos sin ninguna ley definida en un cuartel. Considerando sólo su posición geométrica dentro del cuartel, esos soldados se encuentran con un cierto grado de desorganización. Súbitamente, el oficial de tropa ordena una formación y, después de un cierto tiempo (transición), los soldados pasan a una correcta formación en filas de a cuatro. El conjunto ha adquirido una organización o, mejor dicho, el segundo estado (soldados en formación) posee un nivel de organización mayor que el primer estado (soldados dispersos). Decimos, entonces, que el conjunto adquirió *información*.

Se trata de medir esa información de organización y de determinar la energía mínima necesaria para obtener la organización de una cantidad unitaria de información, pues tal organización no se obtiene gratuitamente, sino que se realiza a expensas de algo.

La información, tomada en este último sentido, puede considerarse *estática*, pues no circula. Se parte de elementos dispersos, se los orga-

niza, adquieren información y permanecen con ella, o bien la pierden (procesos de desintegración, de envejecimiento) o bien esa información puede variar.

El campo de la Teoría de la Información se extiende notablemente con este concepto: la molécula de una substancia contiene una cierta cantidad de información, pues proviene de un conjunto de átomos más o menos dispersos que fueron organizados por reacciones químicas; también es posible analizar una célula de un organismo vivo desde este punto de vista; una red telefónica constituye una organización de un gran número de componentes integrados por el hombre, y, por lo tanto, factible de medida. (L. Brillouin: Science and Information Theory, Capítulo 20: Information, Organization and other problems). Otros símiles ilustrativos son los mensajes cifrados mediante perforaciones en una cinta de papel y las grabaciones en discos y cintas magnéticas.

Se plantea, entonces, el problema de cómo evaluar el contenido de información. Nosotros procedemos a usar el método de Morowitz en series de especies químicas definidas. Por otra parte, calculamos, para ellas, su calor de formación a partir de los elementos químicos en estado atómico y, luego, su entropía termodinámica. Finalmente, establecemos una relación entre la entropía termodinámica y el contenido de información previamente calculado, analizamos su comportamiento y buscamos sus consecuencias y posibles interpretaciones.

En el desarrollo del texto damos detalles que podrían parecer innecesarios. Ellos facilitarán, sin embargo, la comprensión y la crítica del trabajo. Es habitual que, por diversas razones (economía de espacio tipográfico y tiempo, por ejemplo) se omita en las publicaciones científicas referencias, desarrollos, explicaciones, etc. Estimamos que tal proceder es contraproducente, ya que dificulta el entendimiento al lector.

II. — CANTIDAD Y CLASES DE INFORMACION

1. *Cantidad de información.*

a) *Definición.*

La definición de cantidad de información se obtiene de consideraciones estadísticas.

Sea un acontecimiento cualquiera que tenga P_0 posibilidades de ocurrencia. Por ejemplo: se presenta al Sr. NN un conjunto de 16 números y se le solicita que elija uno cualquiera de los 16 números.

El Sr. NN tiene ante sí $P_o = 16$ posibilidades y, por lo tanto, posee una cierta *incertidumbre* antes de realizar la elección. Tal incertidumbre está medida directamente por el número de posibilidades. Suponemos, además, que la probabilidad de elección es igual para todos los números presentados. La información en ese momento es nula y el Sr. NN sólo tiene incertidumbre.

Una vez que el Sr. NN ha elegido uno de los números, las P_o posibilidades se han reducido a una sola: la del número extraído, y el Sr. NN ha dejado de tener incertidumbre. *Decimos que se ha ganado información.*

Podemos caracterizar dos estados:

(a) Estado inicial: $P_0 = 16$ posibilidades: Incertidumbre proporcional a las P_0 posibilidades.
$I = 0$: Información nula.

(b) Estado final: $P_1 = 1$: Se ha realizado la elecciòh y ya no existen más posibilidades de seguir eligiendo; ha quedado sólo el número elegido. No existe ya incertidumbre. Existe la certidumbre del número elegido.
$I_1 \neq 0$: Se adquiere información.

Se define la información I por la expresión que sigue:

$$I = K \log P \qquad (1)$$

K es una constante que tiene en cuenta las unidades a emplear.

De la expresión (1) deducimos, que, cuanto mayor sea la incertidumbre antes de realizar la elección, mayor será la información a extraer.

Adelantemos un poco más en nuestra explicación (Lichtenthal, 1960), tomando otro ejemplo. Supongamos que el Sr. NN desea llegar a cualquiera de los puntos A, B, C..., etc., siguiendo alguno de los caminos indicados (Fig. 1).

El Sr. NN llegará a uno de los puntos finales en cuatro etapas: primero pasará del nivel P al P_1, luego del P_1 al P_2, después del P_2 al P_3 y, finalmente, del P_3 al P_4. Estas etapas se le presentan de tal forma que siempre tiene sólo dos posibilidades de elección.

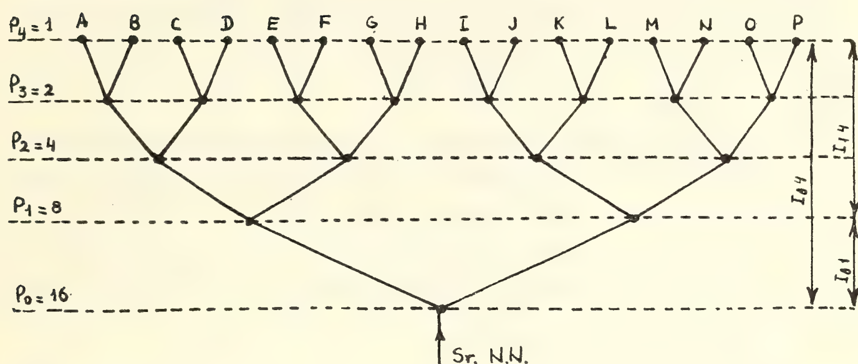
Cuando el Sr. NN pasa de P_0 a P_1 ha ganado algo de informción, pero no toda; será la información que le permitirían obtener las P_o posibilidades si agotara todos los casos, $I_4 = K \log P$ menos la

información que aún le queda por obtener, pues todavía posee incertidumbre representada por las P_1 posibilidades restantes, $I_{14} = K \log P_1$.

Luego:

$$I_{01} = I_{04} - I_{14} = K (\log P_0 - \log P_1) \qquad (2)$$

$$\therefore \quad I_{01} = K \log \frac{P_0}{P_1} \qquad (3)$$



$I_{01} = I_{04} - I_{14}$ (Información ganada al efectuar la primera elección).

FIG. 1 - II

De la misma forma, la información obtenida cuando pasa de P_0 a P_2, será:

$$I_{02} = I_{04} - I_{24} = K \log \frac{P_0}{P_2} \qquad (4)$$

Cuando pasa de P_0 a P_3:

$$I_{03} = I_{04} - I_{34} = k \log \frac{P_0}{P_3} \qquad (5)$$

Y, finalmente, cuando agota las posibilidades:

$$I_{04} = K \log P_0 - K \log P_4 \qquad (9)$$

pero $P_4 = 1$, puesto que ya se ha elegido un punto, entonces:

$$I_{04} = K \log P_0 \tag{7}$$

que es la expresión (1).

Hemos llegado al resultado final descomponiendo el proceso en sucesivas disminuciones de incertidumbre.

b) *Variante en la definición.*

Vimos que la incertidumbre de ocurrencia de un fenómeno es un concepto fundamental en la definición de información.

Podemos decir que la información que es posible obtener de un dado sistema es proporcional al logaritmo de la incertidumbre que ofrece el sistema.

Definimos como incertidumbre i a la inversa de la probabilidad de ocurrencia de un acontecimiento. En el ejemplo anterior, como supusimos todos los casos equiprobables, es:

$$p = \frac{1}{P_0} \text{ (probabilidad)} \tag{8}$$

$$i = \frac{1}{p} = P_0 \tag{9}$$

Observamos que esta definición coincide con la (1):

$$I = K \log i = K \log P_0 \tag{1a}$$

Dado un conjunto de átomos de diferentes clases, es necesario estimar todas las posibles maneras en que pueden combinarse. La probabilidad de que acontezca una de las combinaciones estará dada por los casos favorables a ella dividida por el número de posibles estructuras (Feller, 1958). La recíproca de esta relación mide la incertidumbre de presentación de la combinación química considerada:

$$p = \frac{F}{P} \text{ (probabilidad de la estructura E)} \tag{10}$$

F: número de combinaciones favorables.

P: número de combinaciones posibles.

$$i = \frac{1}{p} = \frac{P}{F} \text{ (incertidumbre de la estructura E)} \tag{11}$$

Si aplicamos la definición (1a), queda:

$$I = K \log i = K (\log P - \log F) \qquad (12)$$

La (12) representa la cantidad de información adquirida al obtener la estructura E, o bien, la cantidad de información de la estructura.

De lo dicho anteriormente se desprende que también es posible decir que *la cantidad de información de una estructura* o que *la cantidad de información que suministra un suceso al ocurrir, es proporcional al logaritmo negativo de su probabilidad de ocurrencia:*

$$I = -K \log p \qquad (13)$$

De la (13) salen inmediatamente la (1a) y la (12).

c) *Unidades de información.*

Si en la expresión (1) empleamos logaritmos en base 2, y hacemos la constante K = 1, obtenemos la información en bits:

$$I = \log_2 P \text{ [bit]} \qquad (K = 1) \qquad (1b)$$

En la Fig. 1 ya hemos explicado, sin decirlo directamente, que es factible llegar a una elección final por medio de sucesivas elecciones binarias. Definamos entonces qué es un bit:

Dado un conjunto de elementos con una incertidumbre i, se dice que se ha obtenido un bit de información cuando se disminuye la incertidumbre a la mitad.

En el ejemplo de la Fig. 1, el Sr. NN primeramente posee una incertidumbre proporcional a 16. Por medio de la primera elección elimina ocho posibilidades (disminuye la incertidumbre a la mitad, luego, gana un bit); en la segunda elección elimina nuevamente la mitad de casos (gana otro bit); en la tercera elección pasa de cuatro a dos posibilidades (nueva disminución de incertidumbre a la mitad, ganancia de otro bit); y, por último, en la decisión final, llega a la certidumbre (obtiene otro bit). En total, adquiere cuatro bits de información.

Luego, cada uno de los niveles de la Fig. 1 representa 1 bit (P_0, 0 bit; P_1, 1 bit; P_2, 2 bits; P_3, 3 bits; P_4, 4 bits).

El resultado obtenido gráficamente concuerda con el teórico:

$$I = \log_2 16 = 4 \text{ bits}$$

Si tomamos logaritmos en base 10, el resultado se da en Hartleys, o sea:

$$\left.\begin{array}{l} I = \log_{10} P \text{ [Hartley]} \\ I = 0{,}3 \log_2 P \text{ [Hartley]} \\ (K = 0{,}3 = \log_{10} 2) \end{array}\right\} \quad (14)$$

Con el mismo criterio que para el bit, podemos decir que cuando disminuimos la incertidumbre de un sistema a la décima parte, hemos ganado un Hartley de información. Se puede construir un esquema semejante al de la Fig. 1, en el que cada punto presenta diez ramificaciones.

Si empleamos logaritmos en base $e = 2{,}718$, el resultado sale en *unidades naturales de información:*

$$\left.\begin{array}{l} I = \log_e P \quad \text{[unidades naturales]} \\ I = 0{,}693 \log_2 P \text{ [unidades naturales]} \\ (K = 0{,}693 = \log_e 2) \end{array}\right\} \quad (15)$$

Es fácil prever la dificultad que aparece en representar el sistema natural, pero sí se puede decir que una unidad natural de información es aquélla que reduce la incertidumbre en una 2,718 ava parte.

Resumiendo

$$(K = 1) \quad I = K \log P = \log_2 P \text{ [bit]}$$

$$(K = 0{,}3) \quad I = K \log P = 0{,}3 \log_2 P = \log_{10} P \text{ [Hartley]}$$

$$(K = 0{,}693) \quad I = K \log P = 0{,}693 \log_2 P = \log_e P \text{ [unidad natural]}$$

$$(1 \text{ unidad natural} = 1{,}443 \text{ bit})$$

$$(1 \text{ Hartley} = 3{,}32 \text{ bit})$$

2. *Clases de información.*

Comenzaremos por resumir qué es lo que dice Brillouin acerca de este tópico. Brillouin (Science and Information Theory, Capítulo 12, The neguentropy principle of information, 1956) distingue dos clases de información:

1) *Información libre* (I_l), que aparece cuando los casos posiblse son completamente abstractos y no poseen ningún significado físico.

2) *Información ligada* (I_i), que aparece cuando los casos posibles pueden ser interpretados como configuraciones de un sistema físico. Nosotros usaremos estas expresiones con un significado algo distinto y agregaremos una clase más de información.

a) *Información libre* (I_l).

Cuando las probabilidades de ocurrencia de un cierto número de fenómenos son todas iguales, se obtiene un valor de información, aplicando la expresión de Shannon, que es máximo (Brillouin, 1956, Khinchin, 1957; Küpfmüller, 1955; Feinstein, 1958).

Llamaremos, entonces, *información libre a la información máxima que se puede extraer de un sistema de acontecimientos.* Se obtiene tal información cuando los elementos del sistema son equiprobables.

b) *Información ligada o interna* (I_i).

Cualquier tipo de restricción que se imponga a los elementos equiprobables del sistema anterior, resulta en una disminución de alguna de las probabilidades componentes y, en consecuencia, decrece también la información que es posible extraer del conjunto. Denominamos a esta información restante *información real* (I_r). El esquema de la Fig. 2-II (a) ilustra estas definiciones.

Ejemplo 1. — Es conocido el código telegráfico corrector de errores de siete unidades, con tres elementos en trabajo y cuatro en descanso (relación 3/4). La información que puede suministrar este código es:

$$I_r = \log_2 \frac{7!}{3!\,4!} = 5{,}1 \text{ [bit/símbolo]} \qquad (16)$$

siendo $\frac{7!}{3!\,4!} = 35$ el número posible de combinaciones que cumplen la relación 3/4.

Sin embargo, si consideramos el número máximo de posibilidades, sin tener en cuenta la restricción "tres elementos en trabajo y cuatro en descanso", sería:

$$I_{máx} = I_l = \log_2 2^7 = 7 \text{ [bit/símbolo]} \qquad (17)$$

La diferencia ($I_l - I_r$) nos da una información que ya está contenida en el código, y la llamaremos *información interna o ligada.* En este ejemplo:

$$I_i = 7 - 5{,}1 = 1{,}9 \text{ [bit/símbolo]} \qquad (18)$$

Se puede decir que la restricción representa una cierta cantidad de información anticipada I_i que se posee acerca del mensaje.

Ejemplo 2. — Si consideramos nuestro alfabeto de 27 letras, con todos sus símbolos equiprobables, podemos calcular un valor máximo de información (información libre):

$$I_{máx} = I_l = \log_2 27 = 4{,}7 \text{ [bit/símbolo]} \quad (19)$$

Podemos decir que se necesitan 4,7 (bit/símbolo) para seleccionar una letra del conjunto de 27 letras cuando sus probabilidades de aparición son todas iguales a 1/27. Algunos autores llaman $H_{máx}$ a este valor (entropia) (Küpfmüller, 1955; Valentinuzzi, 1960; Brillouin, 1956):

$$I_{máx} = H_{máx} = 4{,}7 \text{ [bit/símbolo]} \quad (20)$$

Estudios realizados en el inglés (Brillouin, 1956) demuestran que la cantidad media de información obtenible por símbolo es $I_{ing} =$ 1,93 [bit/símbolo,]. Para el alemán (Küpfmüller, 1955), ese valor es:

$$I_{al} = 1{,}3 \text{ (bit/símbolo)} \quad (21)$$

En los cálculos se consideró las distintas probabilidades de aparición de las letras y de los grupos de letras.

La diferencia entre el valor máximo y los valores reales de información nos dan la información interna media por símbolo:

$$I_{máx} - I_{al} = 4{,}7 - 1{,}3 = 3{,}4 \text{ [bit/símbolo]} \quad (22)$$

$$I_{máx} - I_{ing} = 4{,}7 - 1{,}93 = 2{,}77 \text{ [bit/símbolo]} \quad (23)$$

La información interna está vinculada con la redundancia. Por un lado, la redundancia del lenguaje (la información interna) aumenta innecesariamente el número de bits para transmitir una dada información. Por otro lado, la redundancia proporciona una ayuda y una seguridad del contenido de información frente a perturbaciones extrañas, de tal forma que el receptor, sobre la base de un conocimiento previo del idioma, puede reconocer una frase incompleta (Küpfmüller, 1955; Valentinuzzi, 1960; Ramakrishna y Subramanian, 1958; Brillouin, 1956).

Ejemplo 3. — Dijimos que cada vez que se impone alguna restricción a un sistema, se reduce la información necesaria para determinar uno de los acontecimientos del mismo. Las restricciones pueden esta-

blecerse con una disminución de las probabilidades de ocurrencia o bien fijando casos imposibles (probabilidad nula).

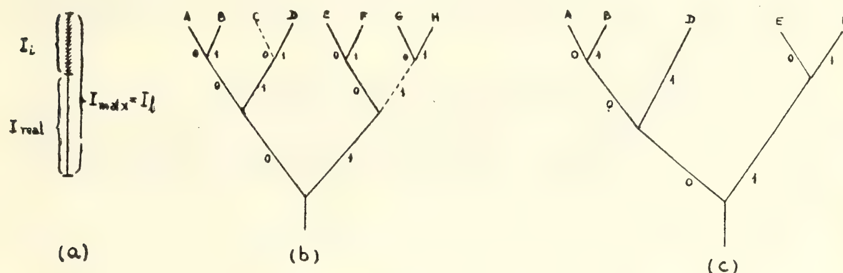
La Fig. 2-II (b) muestra un esquema compuesto de ocho elementos, en el que se suponen imposibles los casos C, G y H. Resulta, en consecuencia, el esquema de la Fig. 2 - II (c). Los casos A, B, D' E y F son equiprobables: p = 1/5 y se tiene:

$$I_{máx} = \log_2 8 = 3 \text{ [bit]} \tag{24}$$

$$I_r = \log_2 5 = 2{,}32 \text{ [bit]} \tag{25}$$

$$I_i = I_{máx} - I_r = 3 - 2{,}32 = 0{,}68 \text{ [bit]} \tag{26}$$

Para seleccionar uno de los cinco casos propuestos se necesitan, entonces, 2,32 [bit], y, con respecto al sistema de ocho elementos equiprobables, el sistema restringido posee una información interna de 0,68 [bit].



$I_l = I_{max} = \log_2 8 = 3$ bits
$I_r = \log_2 5 = 2{,}32$ bits
$I_i = I_{max} - I_r = 0{,}68$ bit

FIG. 2-II.

Ejemplo 4. — Sea ahora un sistema de ocho elementos A, B, C, D, E, F, G, y H, con probabilidades de aparición distintas, a saber:

$p_A = 1/16$; $p_B = 1/8$; $p_C = 3/16$; $p_D = 1/4$; $p_E = 1/16$;
$p_F = 1/16$; $p_G = 1/8$; $p_H = 1/8$.

Aplicando la expresión de Shannon, se obtiene:

$$I_r = 2{,}824 \text{ [bit]}$$

Luego:

$$I_i = I_{máx} - I_r = 3 - 2{,}824 = 0{,}176 \text{ [bit]} \tag{27}$$

Los ejemplos presentados muestran cómo las restricciones disminuyen la cantidad de información disponible de los sistemas. Esas restricciones fijan la *información interna* (redundancia) del sistema. En los idiomas está representada por la gramática de los mismos; en las estructuras químicas, son las leyes que rigen la formación de moléculas: sabemos que un gas noble no puede unirse a ningún otro elemento, salvo condiciones muy especiales, o bien, que hay mayor probabilidad de que el oro se combie con el mercurio que con el cobre.

c) *Información topológica* (Rashevsky, 1955; Karreman, 1955).

Un conjunto de átomos puede adoptar P_0 distintas configuraciones. Alguna de tales configuraciones coincidirá con una determinada estructura química (alguna substancia, algún organismo).

Si consideramos equiprobables a las P_0 configuraciones, de acuerdo con lo expresado en los párrafos anteriores, habremos adquirido, o bien, la estructura habrá alcanzado, una cantidad de información de $I = \log_2 P_0$ [bit].

En esa estructura hallamos elementos físicamente diferenciables, por ejemplo, átomos de C, de H, de O, etc. ¿Qué ocurriría si esa misma estructura poseyera todos sus elementos físicamente indistinguibles?

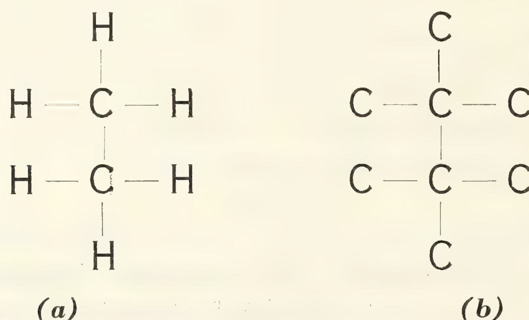


Fig 3-II — Se cambian todos los átomos de H en (a) por átomos de C en (b). Hacemos abstracción de la imposibilidad química de realizar la configuración (b).

Supongamos que sean, por ejemplo, todos átomos de C (Fig. 3-II); evidentemente, la estructura perderá las propiedades físicas que la individualizan como tal o cual substancia, y, también, será otro su contenido de información.

Es posible que un conjunto de elementos, físicamente indiscriminables, pero organizados en una cierta forma, posea un contenido de informa-

ción. Los elementos se distinguen el uno del otro sólo a través de sus *relaciones*.

La información topológiac trata de determinar la cantidad de información de una configuración de elementos sin considerar ni sus propiedades físicas ni sus propiedades métricas, sino sólo la forma en que dichos elementos se relacionan entre sí.

Veamos algunos ejemplos:

La Fig. 4 - II - (a) posee un contenido de información nulo, pues no hay forma de distinguir el punto 1 del punto 2. Sin embargo, si asignamos un sentido a la unión 1-2, aun cuando estos elementos no posean diferencias físicas, son topológicamente distintos: el punto 2 indica un origen y el punto 1 indica una terminación. El contenido de información de la Fig. 4 - II - (b) es 1 bit.

Definamos el orden de un elemento. Cuando un elemento está ligado solamente con un elemento se dice que es de 1er. orden. Si está ligado con dos elementos, es de 2° orden, y así sucesivamente.

En la Fig. 4 - II - (c), el punto 2 es de 2° orden, pues está relacionado con 1 y con 3, mientras que los puntos 1 y 3 son de 1er. orden. Los puntos 1 y 3 son indistinguibles y, si efectuamos una elección al azar, tendremos las siguientes probabilidades:

Puntos de 1er. orden: $p_1 = 2/3$ (1 y 3)

Puntos de 2° orden: $p_2 = 1/3$ (2)

Aplicando la expresión de Shannon es:

$$I_c = -(2/3 \log_2 2/3 + 1/3 \log_2 1/3) = 0{,}92 \text{ [bit]}$$

Si asignamos ahora sentidos (Fig. 4 - II - (d)), el elemento 3 es el origen, el elemento 2 es el extremo final del sentido 3-2 y el origen del sentido 2-1 y el elemento 1 es el extremo del sentido 2-1. Luego, los tres son distintos topológicamente y equiprobables:

$$Id = -3 (1/3 \log_2 1/3) = \log_2 3 = 1{,}59 \text{ [bit]}$$

Las Figs. 4 - II - (e) y (f) presentan puntos topológicamente indistinguibles, luego su cantidad de información es nula.

En la Fig. 4 - II - (g) los tres puntos son topológicamente distintos. Los tres son de 2° orden, pero el 1 es origen de los sentidos 1-2 y 1-3, respectivamente, el 2 es terminación del sentido 1-2 y origen del

sentido 2-3, y el 3 es terminación de los sentidos 2-3 y 1-3, respectivamente:

$$I_j = \log_2 3 = 1,59 \text{ [bit]} \quad \left.\begin{matrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \end{matrix}\right\} = 1/3$$

Veamos ahora la Fig. 4 - II - (h): hay tres puntos de 2° orden (1, 3 y 4) y dos de 3er. orden (2 y 5). El punto 1 es distinguible del 3 y del 4, pero estos dos últimos no lo son entre sí. Los puntos 2 y 5 tampoco son diferenciables. Tenemos, entonces, tres clases de puntos:

1	$p_1 = 1/5$
2 y 5	$p_2 = p_5 = 2/5$
3 y 4	$p_3 = p_4 = 2/5$

$$I_h = -1/5 \log_2 1/5 - 2/5 \log_2 2/5 - 2/5 \log_2 2/5 = 1,53 \text{ [bit]}$$

Si agregamos el punto 6 (Fig. 4 - II - (i)), todos los puntos son distinguibles, y es:

$$I_i = \log_2 6 = 2,6 \text{ [bit]}$$

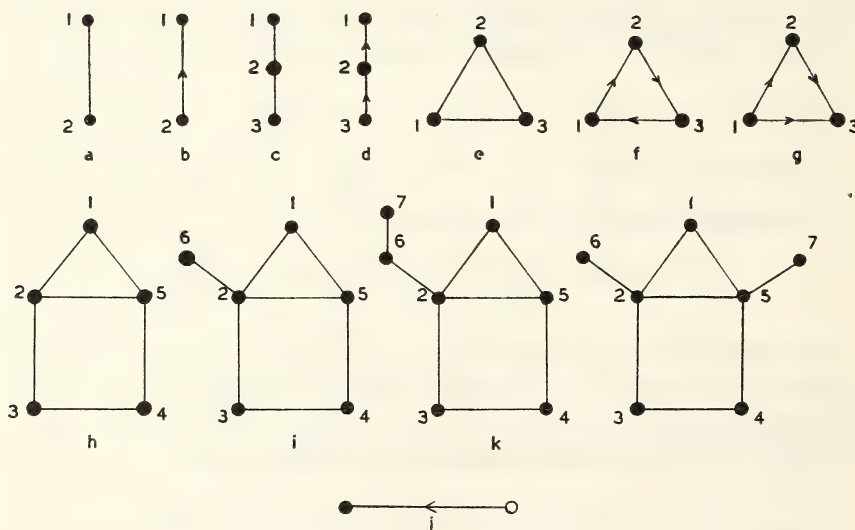


Fig. 4-II. — Información topológica (Rashevsky, 1955).

Si a la estructura (i) le agregamos el elemento 7 en 6, tenemos la Fig. 4 - II - (k), la cual tiene siete puntos topológicamente distintos. Su cantidad de información resulta, aplicando el mismo método de cálculo:

$$I_k = \log_2 7 = 2,82 \text{ [bit]}$$

El agregado del elemento 7 en 5 de (i) da la Fig. 4 - II - (l), cuyo contenido de información es:

$$I_l = 1/7 \log_2 7 + \frac{6}{7} \log_2 7/2 = 1{,}96 \text{ [bit]}$$

El contenido de información de todas las configuraciones de puntos de la Fig. 4 - II se han determinado exclusivamente en base a sus propiedades topológicas. *Lo llamaremos contenido topológico de información.* Pero puede ocurrir que algunos de los puntos sean físicamente diferenciables; entonces el contenido total de información estará dado por el contenido topológico más el contenido debido a diferencias físicas (Fig. 4 - II - (j)).

A continuación damos un ejemplo real de información topológica.

Landsteiner y sus colaboradores iniciaron, en 1917, el estudio de los antígenos azoproteicos (Carpenter, 1956). Se trata de proteínas a las cuales se les ha acoplado un compuesto que determina una particular especificidad inmunológica. Para un mismo compuesto, ésta varía según sea el isómero empleado.

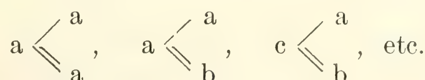
Se puede preparar azoproteínas a partir de las formas *orto, meta* y *para* del ácido aminobenzoico y obtener los sueros correspondientes a cada forma. La reacción de precipitación sólo se produce específicamente entre el suero *orto* y la azoproteína *orto,* el suero *meta* y la azoproteína *meta* y, finalmente, entre el suero *para* y la azoproteína *para.* Cabe atribuir las diferencias antigénicas entre estas azoproteínas a la diferente información topológica que contiene cada una de ellas, la cual depende del compuesto acoplado.

Calcularemos la información tipológica de los tres isómeros del ácido aminobenzoico. Para ello consideramos tres clases de elementos como constituyentes del anillo:



Los designaremos respectivamente por a, b, c. Así resultan los esquemas topológicos (*o*), (*m*), (*p*) correlativos de los isómeros *orto, meta* y *para* (Fig. 5 - II).

Veamos los vínculos entre a, b, c. Examinemos las estructuras cíclicas de la Fig. 5 - II. Aparecen ligaduras



Estimamos la probabilidad de cada una de estas formas de ligaduras dividiendo el número de veces con que se presenta por el número total de elementos, que es seis, o sea, a, a, a, a, b, c. Así resultan, por ejemplo, las probabilidades

$$p_{a \langle^{a}_{a}} = \frac{1}{3} \;;\quad p_{a \langle^{a}_{c}} = \frac{1}{6} \;;\quad p_{b \langle^{a}_{c}} = \frac{1}{6}\,, \text{ etc.}$$

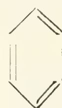
para la estructura (*o*). Con este método obtenemos las siguientes cantidades de información para las estructuras (*o*), (*m*), (*p*):

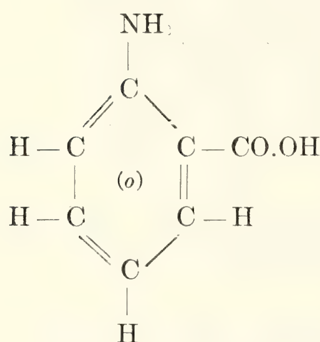
$$I_{(o)} = 1{,}57 \text{ [bit]}$$

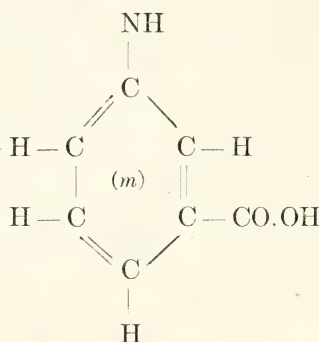
$$I_{(m)} = 2{,}55 \text{ [bit]}$$

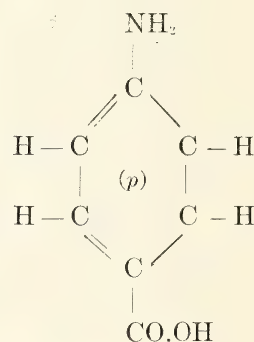
$$I_{(p)} = 1{,}70 \text{ [bit]}$$

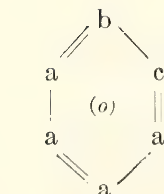
Se entiende que estos valores están dados en bit por molécula.

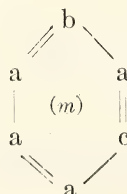
El cálculo hecho sobre las formas simétricas  dan los mismas valores.

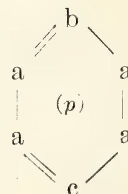












$I_{(o)} = 1{,}57$ [bit] $I_{(m)} = 2{,}55$ [bit] $I_{(p)} = 1{,}70$ [bit]

FIG. 5-II. — Información topológica del ácido aminobenzoico.

Se ve, por consiguiente, que entre los tres isómeros hay, en virtud de su topología, las siguientes diferencias absolutas en cantidad de información:

$$\Delta_{(o,\,m)} = 1{,}57 - 2{,}55 = 0{,}98 \text{ [bit]}$$

$$\Delta_{(o,\,p)} = 1{,}57 - 1{,}70 = 0{,}13 \text{ [bit]}$$

$$\Delta_{(m,\,p)} = 2{,}55 - 1{,}70 = 0{,}85 \text{ [bit]}$$

Parece natural y útil correlacionar con estas diferencias cuantitativas las diferencias antigénicas de las azoproteínas obtenidas a partir del ácido aminobenzoico.

Observemos que los valores $I_{(o)}$, $I_{(m)}$ e $I_{(p)}$ no expresan los contenidos totales de información topológica. Para lograrlos habría que realizar un análisis topológico de las subestructuras a, b y c, cosa que no es necesaria en nuestro ejemplo, donde sólo interesan las diferencias Δ.

III. — INFORMACION Y ENTROPIA

1. *Planteamiento cocneptual.*

Varios autores se han ocupado de la relación entre *información* y *entropía* (Szilard, 1929; Shannon, 1948; Rothstein, 1951, 1952; Bell, 1953; Linschitz, 1953, a; Baer, 1953; Brillouin, 1956). Creemos que se ha cometido un error al introducir la palabra "entropía" en la Teoría de la Información, pues, si bien existe una relación entre ambos conceptos, conduce a serias confusiones el uso de dicho vocablo en lugar de "cantidad media de información por símbolo".

Vimos, en el Capítulo II, que un sistema de acontecimientos puede suministrar una cantidad de información por símbolo que depende de las probabilidades de ocurrencia de esos acontecimientos. Esta información se mide, por ejemplo, en bits, y puede ser transmitida a través de un canal de comunicación. Al sistema propuesto podemos denominarlo *fuente de cantidad media de información* I *por símbolo*. Consideramos que no es conveniente llamar a esta magnitud simplemente "entropía".

En el caso de que la información sea transmitida, el canal tendrá, por su parte, *una capacidad determinada de transmisión de información*, que se mide en *unidad de información* por *unidad de tiempo*; por ejemplo en [bit/seg]. Además, existe algo que tiene en cuenta el hecho de que el mensaje recibido puede ser o no ser igual al mensaje

transmitido. En términos probabilísticos, podríamos hablar de la diferencia entre la *probabilidad a posteriori* y *la probabilidad a priori* de la integridad del mensaje que se transmite; o, de otro modo, cabe definir un *factor de autenticidad del mensaje* (Bell, 1953), el cual se relaciona con el deterioro que éste experimenta en el proceso de conducción por el canal. Ese deterioro (mutilación, desorganización) del mensaje puede hacerse corresponder a la idea de *aumento de entropía.*

En efecto, la entropía mide el orden (o desorden) de un sistema; o también su organización: un vaso con agua caliente y un vaso con agua fría constituyen un sistema con un cierto orden, en el cual diferenciamos perfectamente dos estados (frío y caliente) respecto a nuestra temperatura corporal. Si mezclamos ambos contenidos, se pierde la posibilidad de diferecniar dichos estados. La mezcla desordena el sistema y aumenta su entropía.

Cabe, asimismo, estimar la entropía en términos de la probabilidad de ocurrencia de las distintas disposiciones que pueden adoptar los elementos de un sistema (por ejemplo, ocurrencia de determinados estados energéticos de moléculas). Viene al caso citar la definición de Sir James Jeans (1921) (Bell, 1953): "El aumento de entropía significa el pasaje de un estado más fácilmente distinguible a otro menos fácilmente distinguible o, en otros términos, de una configuración menos probable a otra más probable".

Resulta, por lo tanto, fácil decir que, cuando se efectúa un cambio de esa naturaleza, se *pierde información*, o sea, todo decremento de entropía (pasaje de un estado más probable a otro menos probable) significa un aumento de información. Recordemos lo dicho en el Capítulo II, 1, b): *cuanto menor es al probabilidad de ocurrencia de un fenómeno, tanto mayor es la información a obtener del sistema en que se da ese fenómeno.*

Nos parece conveniente sistematizar esta cuestión en la siguiente forma:

1) A todo sistema de acontecimientos le corresponde, por una parte, una cierta *cantidad de información* I, calculable por la fórmula de Shannon.

2) A todo sistema de acontecimientos le corresponde, por otra parte, una cierta cantidad de *entropía física* (*termodinámica*) *teórica* S_o, calculable por la relación de Boltzman $S_o = k \log_e p$.

3) Cuando en un sistema aumenta I, decrece S , de modo que entre ambas magnitudes vale la igualdad $I = -\alpha S$, en la cual α es un factor de proporcionalidad y, por lo tanto, de conversión.

4) A todo sistema le corresponde una entropía S física (termodinámica) real, experimentalmente determinable.

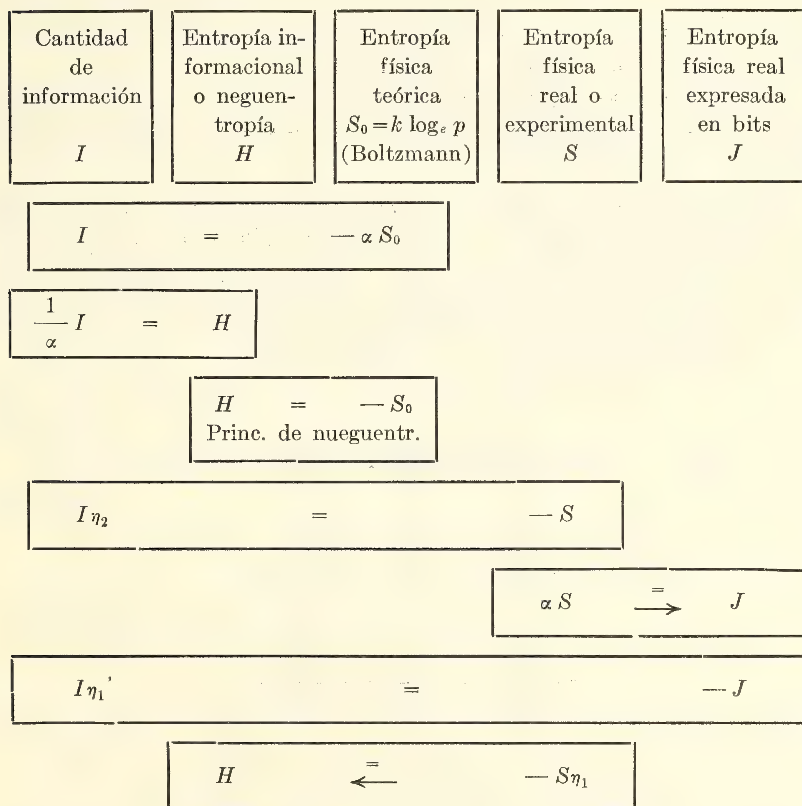
5) Denominaremos *entropía informacional o neguentropía H* al valor que se obtiene para I en unidades entrópicas a partir de la igualdad $\frac{1}{\alpha} I = H$, y, por ser, $I = -\alpha S_0$, resulta $H = -S_0$.

6) La igualdad $H = -S_0$ expresa el *principio de neguentropía* (Schrödringer, 1946; Brillouin, 1956).

7) El cociente entre *información I* y *entropía física real* S conduce a un factor η_2 que permite conversiones recíprocas útiles entre I y S.

En la sección siguiente nos ocuparemos del cálculo de α y, en el Capítulo V, investigaremos el valor de η_2.

En el cuadro sinóptico siguiente resumimos los parámetros que caracterizan una dada estructura y las relaciones entre ellos:



Este cuadro da los lineamientos fundamentales del presente trabajo (véase Capítulo V, 3).

2. *Cálculo del factor de conversión α.*

Como anunciamos en la sección precedente, vamos a ocuparnos aquí del cálculo del factor α, postulado en la igualdad:

$$I = -\alpha S_0 \qquad (1)$$

El signo negativo significa que, cuando la entropía física aumenta, la información disminuye.

Es decir, el propósito es establecer un factor por el cual la entropía física teórica S_0 pueda ser convertida en una cantidad equivalente de información I cuando ambas están expresadas en unidades convenientes. Se sobreentiende que dicho factor servirá también para hallar la neguentropía H.

Haremos uso de un modelo simple, en el cual el conocimiento completo de la estructura requiere una cantidad definida de información I, y en el que un azar completo de estructura conduce a una cantidad de entropía física teórica S_0.

Las evaluaciones independientes de I y S_0 conducen a la determinación de α. En este análisis seguiremos el razonamiento de Linschitz (1953, a).

Consideremos un cristal constituído por moléculas de tipo A-B que pueden ser colocadas en sus puntos reticulares en cualquiera de dos, y sólo dos orientaciones, A-B, o B-A. La especificación de la orientación de cada molécula requiere así una elección binaria, o sea, un bit de información (II, 1, c) (Fig. 1 - III).

A | B   B | A   B | A
A | B   A | B   B | A
B | A   B | A   A | B

Fig. 1-III.

Para especificar la orientación de N moléculas se necesitan N bits.

La entropía física teórica proveniente del azar de orientación es:

$$S_0 = -k \log_e P \quad \text{(fórmula de Boltzmann)} \qquad (2)$$

$$\left(p = \frac{1}{P}\right)$$

donde P es el número total de formas en las cuales el cristal puede ser armado, considerando sólo diferentes combinaciones de orientación.

El número P de posibilidades de N moléculas es 2^N (Feller, 1958). Luego:

$$S_0 = -k \log_e 2^N \qquad (3)$$

Si N es el número de Avogadro N_A, se tiene:

$$S_0 = -k \log_e 2^{N_A} = -\frac{R}{N_A} \log_e 2^{N_A} = -R \log_e 2 \left[\frac{\text{cal}}{°K \times \text{mol}}\right] \qquad (4)$$

Esta fórmula para la entropía física se verifica por determinaciones calorimétricas directas de la entropía de substancias como el CO o el N_2O, y por comparación con valores computados a partir de datos espectroscópicos. Se halla discrepancias entre valores calorimétricos y espectroscópicos que se interpretan como producidos por la entropía residual de orientación al azar "congelada" en el cristal y no experimentalmente observada en las medidas de capacidad calorífica (Clayton y Giaucque, 1932; Blue y Giaucque, 1935) (Linschitz, 1953, a). *Sale, así, una entropía que vale $R\log_e 2$, o sea, 1,377 [cal/K°×mol] cuando se dan N_A bits de información*; como dice Linschitz, *se extrae del sistema dicha cantidad de entropía cuando se le da N_A bits de información.*

Si nos remitimos a las definiciones dadas en II, 1, c, fórmula (1a), tenemos:

$$I = K \log i = K \log P = \log_2 2^{N_A} = N_A \left[\frac{\text{bit}}{\text{mol}}\right] \qquad (5)$$

Dividiendo la (5) por la (4), obtenemos:

$$\frac{I}{S_0} = \frac{N_A \left[\frac{\text{bit}}{\text{mol}}\right]}{-R \log_e 2 \left[\frac{\text{cal}}{°K \times \text{mol}}\right]} \qquad (6)$$

$$\alpha = -\frac{I}{S_0} = \frac{1}{k \log_e 2} \left[\frac{\text{bit}}{\text{cal}/°K}\right] = 4{,}3 \times 10^{23} \left[\frac{\text{bit}}{\text{cal}/°K}\right] \qquad (7)$$

En consecuencia, y conforme a la igualdad (1), *para pasar de S_0 unidades entrópicas a I unidades de información, usaremos la expresión:*

$$I = -4{,}3 \times 10^{23} \left[\frac{\text{bit}}{\text{cal/°K}}\right] \times S_0 \left[\frac{\text{cal/°K}}{\text{mol}}\right] \qquad (8)$$

y para pasar de I unidades de información a S_0 unidades entrópicas emplearemos:

$$S_0 = -0{,}229 \times 10^{-23} \left[\frac{\text{cal/°K}}{\text{bit}}\right] \times I \left[\frac{\text{bit}}{\text{mol}}\right] \qquad (9)$$

Otra manera de considerar el asunto (Linschitz, 1943, a) es la siguiente: Si P representa el número total de estados cuánticos disponibles para una molécula, entonces el número de elecciones binarias necesario para seleccionar un solo estado particular es I, donde I se obtiene por solución de la ecuación:

$$2^I = P \qquad (10)$$

La entropía por molécula es:

$$S_0 = -k \log_e P = -k \log_e 2^I \qquad (11)$$

$$S_0 = -k\, I \log_e 2 \qquad (12)$$

$$I = -\frac{S_0}{k \log_e 2} \qquad (13)$$

que es igual a la (6).

Si deseamos expresar la información I en términos de selecciones enarias en lugar de selecciones binarias, un razonamiento similar lleva al factor general de conversión:

$$\alpha = \frac{1}{k \log_e n} \qquad (14)$$

3. *Estimación del significado de la relación entre información y entropía termodinámica.*

Szilard (1929) fué el primero que efectuó un análisis del vínculo existente entre información y entropía. Posteriormente Shannon redescubrió la conexión entre ambas magnitudes.

Sin embargo, esta relación es puramente formal, y permite medir ambas magnitudes, entropía e información, en la misma unidad,

dando una equivalencia entre la entropía teórica de una estructura y su correspondiente cantidad de información. *No tiene sentido pretender calcular la entropía física real de un sistema a partir de razonamientos propios de la Teoría de la Información.* La discrepancia entre S y S_0 se podría explicar diciendo: S_0 mide la entropía que se elimina por organización del sistema; S comprende a S_0 y a una porción que involucraría fenómenos correlativos de la organización en sí (metabolismo, por ejemplo). Para ilustrar estos conceptos se puede pensar el siguiente ejemplo: Un sistema constituído por válvulas electrónicas puede variar su entropía real en un cierto valor para organizar y operar un dado número de bits en un canal. Otro sistema, constituído ahora por transistores, variará probablemente mucho menos su entropía física real para cumplir las mismas funciones respecto al mismo número de bits. Las energías puestas en juego en ambos sistemas son completamente distintas, pero ambos integran y mueven la misma cantidad de información. Podríamos hablar de rendimiento de los sistemas si relacionamos el número de unidades entrópicas con el número de bits. Entonces diríamos que en el sistema valvular necesitamos n_1 unidades entrópicas/bit, y, en el sistema transistorizado, sólo empleamos n_2 unidades entrópicas/bit. Este segundo valor con toda seguridad será menor que el primero.

Dese el punto de vista cibernético, lo que acabamos de exponer encuadra dentro de la concepción general de acoplamiento de dos circuitos: un *circuito informacional,* por el cual sólo circula información; y un *circuito energético,* por el cual sólo circula *energía* (Ducrocq, 1955).

IV. — METODOS PARA EVALUAR LA INFORMACION DE ESTRUCTURAS QUIMICAS

En este capítulo vamos a exponer algunos métodos que han sido usados para evaluar la información de estructuras químicas. Estimamos que esto es útil para adquirir una visión de conjunto de los recursos que la Teoría de la Información va dando en este dominio de trabajo.

Los razonamientos de dichos métodos se basan, como es corriente en Filosofía Natural, en *modelos.* La eficacia heurística y la aceptabilidad de los mismos podrá ser estimada en el futuro de manera análoga a como se ha hecho con los modelos del átomo.

1. *Método de Linschitz.*

Henry Linschitz (1953, b), de la Universidad de Siracusa (Estados Unidos de Norteamérica), ha desarrollado un cálculo aproximado del límite superior del grado de organización de una célula bacteriana en base a un análisis termodinámico del metabolismo. Su método estima el incremento de entropía causado por el metabolismo, representado por los desechos calulares por generación, y lo igala al decremento de entropía que se produce al organizarse la célula. El estudio de Linschitz no se refiere, como se ve, a especies químicas definidas, sino a la estructura complexiva de la materia viviente.

La célula incorpora, por unidad de tiempo, material formativo en bruto que posee una energía libre F_i. Ese material es metabolizado y convertido en dos clases de productos, a saber, productos con mayor energía libre F_H y productos con menor energía libre F_L que F_i. En caso de que la primera clase de productos sea retenida por la célula, ésta cambia su energía libre en la cantidad:

$$\Delta \dot{F}_{\text{interna}} = F_H - \alpha F_i \tag{1}$$

Por otra parte, los productos de desecho implican una variación de energía libre dada por la siguiente expresión:

$$\Delta \dot{F}_{\text{externa}} = F_L - \beta F_i \tag{2}$$

El punto sobre la variación simboliza la media respecto al tiempo; α, β son factores estequiométricos. En otras palabras, αF_i expresa la parte de energía libre de los ingesta correspondiente a las substancias que pasan a ser de mayor energía libre; βF_i, la parte correspondiente a las substancias que se transforman en productos de desecho con energía libre F_L.

Por el Segundo Principio de la Termodinámica debe cumplirse la expresión:

$$\Delta \dot{F}_{\text{interna}} + \Delta \dot{F}_{\text{externa}} \leq 0 \tag{3}$$

Esta expresión describe el hecho de que la síntesis de material con mayor contenido en energía libre se acopla a procesos biológicos que dan lugar a un decrecimiento de la energía libre.

Tomemos el caso ideal (con el objeto de calcular el límite propuesto) de una célula que es perfectamente eficiente en su trabajo

de síntesis. En tal caso, vale la igualdad:

$$\Delta \dot{F}_{interna} = -\Delta \dot{F}_{externa} \qquad (4)$$

Por ser:

$$F = H - TS \qquad (5)$$

a temperatura constante, de la (4), resulta:

$$\Delta \dot{H}_{interna} - T \Delta \dot{S}_{interna} = -(\Delta \dot{H}_{externa} - T \Delta \dot{S}_{externa}) \qquad (6)$$

Luego:

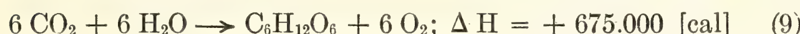
$$\Delta \dot{S}_{interna} = \frac{1}{T} (\Delta \dot{F}_{externa} + \Delta \dot{H}_{interna}) \qquad (7)$$

La ecuación (7) *representa el límite del cambio de entropía por unidad de tiempo del material formativo incorporado en una célula ideal.* Como unidad de tiempo se toma la duración de una generación de células.

Linschitz hace una aplicación numérica de la ecuación (7) para *Bacillus picnoticus*. Las reacciones químicas del metabolismo de este microorganismo son:



$$H_2 + 1/2\ O_2 \longrightarrow H_2O \quad ; \quad \Delta F = -56.000\ [cal] \qquad (8)$$



$$6\ CO_2 + 6\ H_2O \longrightarrow C_6H_{12}O_6 + 6\ O_2; \ \Delta H = +675.000\ [cal] \qquad (9)$$

Se ha comprobado experimentalmente que, en condiciones muy favorables de crecimiento, para la absorción de un volumen de CO_2 son necesarios ocho volúmenes de H_2. Puesto que el anhidrido carbónico debe convertirse en hidrato de carbono, en este proceso, un gramo, o sea, 1/2 mol de carbono requerirá, para esa conversión, 8/12 moles de H_2. Según la ecuación (8), dicha conversión implica una disminución de energía libre:

$$\Delta F_{externa} = \frac{8}{12} (-56.000\ cal) = -37.400\ [cal] \qquad (10)$$

Este es uno de los términos de la ecuación (7). Otro de los términos, la variación de entalpía $\Delta H_{interna}$, se estima en la siguiente forma: En un mol de glucosa (que se toma como substancia celular) entran seis moles de carbono, esto es, 72 gramos de carbono. Para un gramo de carbono, la variación de entalpía $\Delta H_{interna}$ será 1/72

del valor dado por la ecuación (9):

$$\Delta H_{\text{interna}} = \frac{675.000 \text{ cal}}{72} = +9.400 \text{ [cal]} \qquad (11)$$

Evidentemente, en estos cálculos termoquímicos se realiza una aproximación grosera esquematizando el metabolismo de *Bacillus picnoticus* por las ecuaciones (8) y (9). Sin embargo, estos razonamientos bastan para el fin que se persigue.

A la temperatura de 27° C (300 °K), las ecuaciones (7), (10) y (11) dan:

$$\Delta S_{\text{interna}} = \frac{1}{300} (-37.400 + 9.400) \left[\frac{\text{cal}}{\text{°K}}\right] = -90 \left[\frac{\text{cal}}{\text{°K}}\right] \qquad (12)$$

Ahora bien: ¿A cuántas células corresponde un gramo de carbono? Las células bacterianas contienen un 10 % de carbono, o sea, *un gramo de carbono corresponde a 10 gramos de microorganismos.* Por otra parte, un microorganismo tiene una masa de 10^{-12} [g], así que, *un gramo de carbono corresponde* a 10^{13} *células.*

Las — 90 [cal/°K] referentes a un gramo de carbono *corresponden a 10 gramos de células*, esto es, a un gramo de células le corresponden aproximadamente, — 10 [cal/°K]. Si se toma el número de células (10^{13}) que obtuvimos para un gramo de carbono, resultan -10^{-11} [cal/°k] para cada célula.

Para expresar en bits esta disminución de entropía lograda por la actividad sintética de la célula basta aplicar la transformación vista en el Capítulo III. Se tiene, así:

$$I = -\frac{\Delta S/\text{célula}}{k \log_e 2} = 10^{13} \left[\frac{\text{bit}}{\text{célula}}\right] \qquad (13)$$

Destaquemos que Linschitz toma, de hecho, $S = S$.

2. *Método de Dancoff y Quastler.*

La complejidad de un sistema depende del número de partes que lo componen y de las correlaciones de esas partes. El número de partes implica un gran contenido de información, pero la medida de ésta no traduce exhaustivamente la complejidad del sistema, ya que no se involucran en ella las correlaciones. Sin embargo, un ensayo de cálculo que considere el número de partes es útil como aproxima-

ción al conocimiento de la complejidad. Es correcto tomar el *concepto de complejidad* como equivalente al *concepto de organización.*

Cada parte que integra a un organismo se especifica por su nombre y las características de su situación respecto al entorno en que va colocada. Por lo tanto, la cantidad de información, o sea, el conjunto de instrucciones necesarias para individualizar cualquier parte constitutiva debe ser una función del número y la frecuencia de las combinaciones de clases y la situación de las partes. Este modo de razonar será retomado más explícitamente en el método de Morowitz.

Si $p\ (k;\ j)$ es la probabilidad relativa de que ocurra la combinación k de clase y situación de la parte j, a esta parte le corresponde la información:

$$I\ (j) = -\sum_{k} p\ (k;j) \log_2 (k;j) \qquad (14)$$

La información de la estructura del sistema debe ser igual a la suma de las cantidades de información que aporta cada parte j, o menor que esa suma si algunas combinaciones son imposibles. Escribiremos, en consecuencia:

$$I \text{ estructura} \leq \sum_{j} I\ (j) \qquad (15)$$

Sobre estas bases, Dancoff y Quastler (1953) (Zemanek, 1959) estiman el contenido informacional de un organismo, tomando, en primer lugar, como *partes* los *átomos*; y, en segundo lugar, las *moléculas.*

a) *Estimación cuando se considera los átomos como partes constitutivas.*

En la materia viviente hay unas 64 clases de elementos químicos (carbono, oxígeno, hidrógeno, azufre, fósforo, etc.). La proporción es diferente para cada elemento (hidrógeno: 65 %; oxígeno: 22 %; carbono: 7 %, etc.). Estos porcentajes expresan la probabilidad de que resulte un átomo de determinado tipo al elegir átomos al acaso en una porción de materia viva. La aplicación de la fórmula (14) da, con $p_H = 0{,}66$; $p_O = 0{,}22$; $p_C = 0{,}07$, etc., un promedio aproximado de 1,5 bits necesarios para especificar un átomo.

Otra parte de información proviene de la situación de los átomos. Su evaluación se funda en el hecho de que las correlaciones atómicas en una molécula quedan determinadas si se conoce la situación de los núcleos de los átomos. Para ello, se procede a dividir una celda

de un centímetro cúbico de materia en subceldas parcialmente superpuestas cuya arista mide 4 Å. El cálculo da 8×10^6 para el número de cubitos posibles, de 0,02 Å de arista, dentro de la celda de 4 Å. El logaritmo de 8×10^6 en base 2, esto es, 23 bits es el límite superior de la cantidad de información necesaria para especificar la situación de cualquier átomo en un organismo vivo.

El valor derivado del tipo de átomos y el valor obtenido del análisis de la situación dan, sumados, 24,5 bits para el límite superior de la especificación de un átomo como parte formativa de la estructura biológica.

Ahora bien, sólo un décimo de los átomos es estructuralmente significativo, ya que, en la materia viviente, hay 9/10 de agua y existen otras substancias indiferentes. Es decir, el límite hallado se reduce a 2,45 bits. El ser humano adulto contiene alrededor de 7×10^{27} átomos; por lo tanto:

$$I \text{ hombre } \leq 2{,}45 \times 7 \times 10^{27} \cong 2 \times 10^{28} \text{ bits} \qquad (16)$$

b) *Estimación cuando se considera las moléculas como partes constitutivas:*

Las moléculas que poseen significación como partes integrantes de la materia viva contienen de unos quince átomos (aminoácidos, por ejemplo) a unos centenares de átomos (porfirinas, ácido nucleico, etc.). Además, hay unos quinientos tipos de esas moléculas que se presentan con significativa frecuencia. Si, por cada tipo, la frecuencia es diferente, se tiene, según Dancoff y Quastler, 4 bits por tipo de molécula. Respecto a la información debida a la forma en que puede situarse una molécula, se puede, según estos autores, aceptar 3 bits como valor groseramente aproximado. Por consiguiente, por su tipo y su situación, cada molécula se identifica con 7 bits. Un décimo de la materia viva es bioestructuralmente de interés, así que dicho valor se reduce a 0,7 bits por molécula. Supuesto un promedio de cien átomos para cada molécula, queda 0,007 bits por átomo. Para cada individuo humano adulto sale ahora:

$$I \text{ hombre } \leq 0{,}007 \times 7 \times 10^{27} \cong 5 \times 10^{25} \text{ bits} \qquad (17)$$

Este valor es menor que el (16) por cuanto los átomos reducen sus posibilidades de ubicación y situación al estar incorporados en las moléculas.

c) *Contenido de información de una célula germinativa.*

La función determinativa de los caracteres morfoanatómicos y fisiológicos de un ser vivo se halla en los cromosomas. Descontando el material genéticamente no significativo, se admite que la información correspondiente a esos caracteres está contenida en un volumen de 1 μ^3. En él caben unos 10^{12} átomos o unas 10^{10} grandes moléculas. Si, como dijimos en b), a cada molécula corresponden 7 bits, resulta:

$$I \text{ cél. germinativa} \leq 7 \times 10^{10} \cong 10^{11} \text{ bits} \qquad (18)$$

Esta cantidad de información bastaría para el desenvolvimiento del individuo, y sería el límite superior de la complejidad (máxima organización). Evidentemente, es muy inferior al valor calculado en b).

Otro camino para estimar el contenido informacional genético es el de considerar el fenotipo. Sobre la base del modelo genómico de la ristra de cuentas, se admite que cada gen es una unidad independiente y físicamente separada, capaz de adquirir un número limitado de estados discretos llamados *alelos.* Desde el punto de vista de la Teoría de la Información, el gen se conceptúa como una fuente independiente de información, cuya incertidumbre depende del número de estados alélicos, de modo que:

$$I_{\text{genoma}} \leq \text{Número de genes} \times I_{\text{gen}} \qquad (19)$$

Según Dancoff y Quastler (1953), el valor de esta expresión sería de unos 10^5 bits, el cual marcaría el límite inferior de la complejidad de un ser vivo.

Por los valores del contenido informacional que acabamos de consignar en esta sección se ve que los mensajes genéticos tienen una cantidad de información inferior a la que posee el individuo desarrollado que les corresponde. *Habría, pues, un fenómeno de compresión.* Cabe pensar que, sobre la información hereditaria, las síntesis químicas de crecimiento incorporan nueva información en la materia viviente. En la determinación de esta información sobreagregada intervendría un proceso de correlación.

3. *Método de Branson.*

El biofísico Herman R. Branson (1953), de la Howard University (Washington), ha investigado la cantidad de información de las moléculas de proteína basándose en el análisis configuracional de los aminoácidos componentes.

a) *Teoría:*

Las proteínas están compuestas por un cierto número, que llamaremos N, de aminoácidos de m clases diferentes. Cada residuo aminoácido puede hallarse en diversos *estados microcanónicos* o *configuraciones* (complexiones). Por ejemplo, un residuo aminoácido de clase i se presenta con diferente longitud, o su grupo R varía por su extensión o su ángulo, etc. Si bien hasta hoy la investigación informacional no ha podido evaluar una influencia determinativa recíproca entre los aminoácidos integrantes de la molécula de proteína como la que acontece entre las letras y las palabras de un idioma (Augenstine, Branson y Carver, 1953) (Capítulo II, 2, b), ella no queda realmente excluída. En el método del cual tratamos ahora se omite la consideración de esa posible influencia.

Sea P_i el número de configuraciones del aminoácido de tipo i. Como hay m diferentes tipos, para ellos escribiremos $P_1, P_2, \ldots P_i \ldots P_m$.

Si de cada tipo i existen n_i aminoácidos, de manera que

$$\sum_i^m n_i = N \tag{20}$$

el número total de posibilidades con que puede presentarse una proteina de N aminoácidos es:

$$P = \frac{N!}{\prod_{i=1}^{m} n_i!} \prod_{i=1}^{m} P_i^{n_i} \tag{21}$$

Una proteína real representa una de las posibilidades correspondientes a un sistema formado por N aminoácidos, de los cuales hay m tipos que aparecen según los números $n_1, n_2, n_3, \ldots n_i \ldots n_m$. El número de moléculas proteicas diferentes que corresponde a estas condiciones de composición es:

$$P^{(P)} = \prod_{i=1}^{m} P_i^{n_i} \tag{22}$$

La relación del Bolstzmann, que hemos citado en el Capítulo III, da, para la entropía teórica de (21) y (22), respectivamente:

$$S_0 = -k \log_2 P \tag{23}$$

$$S_0^{(P)} = -k \log_2 P^{(P)} \tag{24}$$

Al realizarse una determinada proteína en la Naturaleza, debe producirse, por cuanto se trata de un proceso de organización, una disminución de entropía. Esa disminución viene dada por la diferencia entre (23) y (24):

$$-\Delta S_0 = S_0 - S_0^{(P)} = k \log_e \frac{P}{P^{(P)}} \qquad (25)$$

Introduciendo los valores (21) y (22) en la (25), tenemos:

$$\Delta S_0 = -k \log_e \frac{N!}{\prod_{i=1}^{m} n_i!} = k \left(\sum_{i=1}^{m} \log_e n_i! - \log_e N! \right) \qquad (26)$$

Por el principio de neguentropía (Capítulo III), Branson escribe directamente:

$$H = -k \left(\sum_{i=1}^{m} \log_e n_i! - \log_e N! \right) \qquad (27)$$

Para mantener la uniformidad de la notación habría que poner ΔH Conforme con lo que quedó establecido en el Capítulo III para obtener I hay que multiplicar la (27) por α.

Si n_i y N son mayores que 100, cabe aplicar la fórmula de Stirling para establecer una expresión aproximada. Pongamos:

$$\log_e n_i! \simeq n_i (\log_e n_i - 1) \qquad (28)$$

$$\log_e N! \simeq N (\log_e N - 1) \qquad (29)$$

Con estas fórmulas y la condición (20), la (27) se transforma en la siguiente expresión:

$$H = -k \left[\sum_{i}^{m} n_i (\log_e n_i - 1) - N (\log_e N - 1) \right] =$$

$$= -k \left[\sum_{i}^{m} n_i \log_e n_i - \log_e N \sum_{i}^{m} n_i \right] = -k \left[\sum_{i}^{m} n_i \log_e \frac{n_i}{N} \right] \qquad (30)$$

El cociente entre esta neguentropia (30) y el número N de residuos aminoácidos da la naguentropía por residuo, esto es:

$$H_R = -k \sum_{i}^{m} \frac{n_i}{N} \log_e \frac{n_i}{N} \qquad (31)$$

Observemos que la relación n_i/N traduce la probabilidad P_i de elegir un residuo de tipo i entre los N posibles, de modo que la (31) no es otra cosa que la fórmula de Shannon, a menos de la constante que convierte los logaritmos naturales en logaritmos en base 2. Por consiguiente, escribiremos la (31) así:

$$H_R = -k \sum_{i}^{m} p_i \log_e p_i \tag{32}$$

En sus cálculos númericos, Branson (1953) utiliza, además de H_R, otros dos parámetros, a saber, la *neguentrapía* $H_{máx}$, y la *neguentropía mínima* $H_{mín}$, así como las relaciones $H/H_{máx}$, $H/H_{mín}$. La neguentropía máxima se define como el máximo valor que adquiere la expresión (27) con determinados valores de N y m. La neguentropía mínima es la cantidad de neguentropía de una proteína hipotética formada por N aminoácidos de los cuales contiene uno sólo de cada tipo.

b) *Aplicaciones:*

Vamos a transcribir los cálculos hechos por Branson para la *insulina*. La Tabla 1-*IV* contiene los tipos de aminoácidos que forman la molécula de esta proteína, el número con que interviene cada uno de ellos y los logaritmos en base 10 de los factoriales de esos números. De esta tabla salen los datos numéricos necesarios para aplicar la fórmula (27):

$$\left.\begin{aligned} \sum_{i=1}^{m=16} \log_e n_i\,! &= 58{,}611 \times 2{,}303 = 134{,}98 \\ \log_e N\,! &= 164{,}01 \times 2{,}303 = 387{,}72 \end{aligned}\right\} \tag{33}$$

(2,303 es el factor para convertir $\log_{10}$ en $\log_e$)

$$H = -k\,(134{,}98 - 387{,}72) = 252{,}7\,k \tag{34}$$

El valor $H_{máx}$ se obtiene distribuyendo el número $N = 103$ de aminoácidos en la forma más uniforme posible en las $m = 16$ clases. La forma más uniforme es 7 clases con 7 aminoácidos cada una y 9 clases con 6 cada una. Así tenemos:

$$\begin{aligned} (9 \times \log_{10} 6\,! + 7 \times \log_{10} 7\,!) \times 2{,}303 &= \\ = (25{,}71 + 25{,}91) \times 2{,}303 &= 118{,}9 \end{aligned} \tag{35}$$

$$\therefore \quad H_{máx} = -k\,(118{,}9 - 387{,}7) = 268{,}8\,k \tag{36}$$

Conforme con la definición de neguentropía mínima, se tiene:

$$\sum_{i=1}^{m=16} \log_e n_i\,! = [\log_e 1\,! + \log_e 1\,! + \ldots + \log_e (N - m + 1)\,!\,] =$$

$$= \log_e 88\,! = 2{,}303 \log_{10} 88\,! = 134{,}29 \times 2{,}303 = 309{,}2 \quad (37)$$

$$\therefore \quad H_{min} = -k\,(309{,}2 - 387{,}7) = 78{,}5\,k \quad (38)$$

TABLA 1-IV. — *Residuos aminoácidos de la insulina*
(Branson, 1953)

Clase de residuos	n_i	$\log_{10} n_i$
1. Glicina	7	3,702
2. Alanina	6	2,857
3. Valina	8	4,606
4. Leucina	12	8,680
5. Isoleucina	3	0,778
6. Fenilalanina	6	2,857
7. Prolina	3	0,778
8. Serina	6	2,857
9. Treonina	2	0,301
10. Tirosina	9	5,560
11. Hidroxiprolina	—	—
12. Cisteína	—	—
13. Cistina	12	8,680
14. Metionina	—	—
15. Triptofano	—	—
16. Acido aspártico	6	2,857
17. Acido glutámico	15	12,116
18. Histidina	4	1,380
19. Arginina	2	0,301
20. Lisina	2	0,301
Totales	$N = 103$ $m = 16$	58,611

Con (34), (36) y (38) calculamos:

$$\left.\begin{aligned} H_R &= \frac{H}{N} = \frac{252{,}7\,k}{103} = 2{,}45\,k \\ \frac{H}{H_{máx}} &= \frac{252{,}7\,k}{268{,}8\,k} = 0{,}940 \\ \frac{H}{H_{mín}} &= \frac{252{,}7\,k}{78{,}5\,k} = 3{,}22 \end{aligned}\right\} \quad (39)$$

Branson usa también un valor máximo de neguentropía calculado para una molécula hipotética que estuviese constituida por 20 residuos aminoácidos con distribución uniforme. Para la insulina resulta:

$$H_{máx\,(20)} = 287\ k \tag{40}$$

Se puede computar esta otra relación:

$$\frac{H}{H_{máx\,(20)}} = 0{,}88 \tag{41}$$

Este método ha sido aplicado por Branson a 26 proteínas (salmina, edestina, fibrinógeno, pepsina, tiroglobulina, etc.). Los resultados numéricos conducen a importantes conclusiones. Mencionaremos las siguientes:

1) El contenido de neguentropía de la molécula proteica tiende a un máximo. En efecto, $H/H_{máx}$, $H/H_{máx\,(20)}$ se aproximan a la unidad. El comportamiento de $H/H_{mín}$ reforzaría la idea de que esta tendencia no es accidental. En un terreno puramente especulativo, cabe postular que la ocurrencia de seres vivos resultó posible cuando la síntesis química natural condujo a la agregación de residuos aminoácidos cuyo $H/H_{máx} > \varepsilon > 0{,}5$, con un número de residuos $N \geq N_0 \geq 400$. Este es, por supuesto, un límite provisorio.

2) Ninguna de las proteínas analizadas que integran estructuras vivientes tiene $H/H_{máx} < 0{,}70$. Cabe sospechar que hay algún vínculo entre contenido de neguentropía y función de la molécula proteica.

3) La cantidad de neguentropía por residuo aminoácido H_R no se correlaciona con el peso molecular. En efecto, los valores de esta relación están alrededor de 2,50.

4) Para que una proteína sea antigénica, su H/Hmáx debe ser mayor que 0,7, pues esta condición hace más probable la presencia de cuatro residuos aminoácidos en su zonas antigénicas.

5) Si se toma $m = 20$, y N es divisible por m, se obtiene:

$$H_{R\ máx} \cong 3\ k \tag{42}$$

Este valor resulta de introducir dichas condiciones en la fórmula (27), con $n_1 = n_2 = \ldots = n_m = \dfrac{N}{m}$.

4. *Método de Morowitz.*

El método de Morowitz (1955) es el que tomamos como base para nuestros cálculos numéricos de especies químicas definidas. En el

párrafo siguiente delinearemos la forma en que lo aplicamos. Ahora vamos a exponer, en primer término, dicho método tal como lo da su autor; luego transcribiremos los cálculos de Morowitz para un caso concreto, y, finalmente, nos ocuparemos de las aproximaciones involucradas en esta teoría.

a) *Teoría*

Consideremos una célula de volumen determinado. El material químico que la compone puede dar lugar a un gran número N_p de configuraciones. De éstas, sólo un cierto número N_f, que es muchísimo menor que N_p, corresponde al estado de célula viva. La probabilidad de existencia de una estructura E viviente será, pues, la que definimos en el Capítulo II, 1, b, fórmula (10). Vale, además, la expresión (11) del mismo párrafo.

Supongamos que N_f vale la unidad. Esto significa que, de todas las configuraciones posibles que pueden generar los átomos componentes, sólo una corresponde al estado vivo. Con esa condición, y usando logaritmos en base 2, la fórmula (13) del Capítulo II, 1, b se convierte en:

$$I_E = \log_2 N_p \tag{43}$$

Se trata ahora de calcular el número total de configuraciones posibles N_p. Para ello, pensamos que la célula está dividida en celdas y que hay un átomo en cada celda (Fig. 1-*IV*.). Si la célula se halla

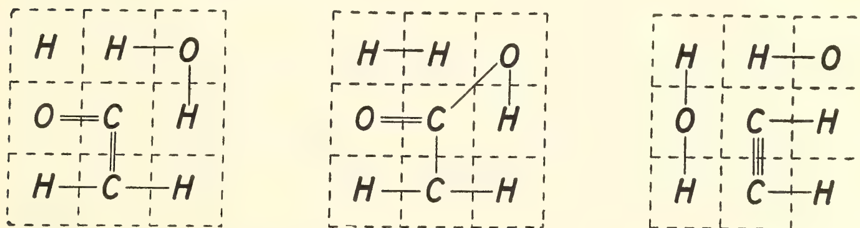


FIG. 1-IV. — Esquemas de distribuciones de átomos (Morowitz, 1955).

formada por un número M de átomos y, de éstos, existen n_i de clase i, es posible el siguiente número de distribuciones sobre las celdas:

$$N_1 = \frac{M!}{\prod_i n_i!} \tag{44}$$

Veamos qué ocurre con las ligaduras entre M átomos. Tal como lo ilustran los simples esquemas (a), (b) y (c) de la Fig. 1-IV, los átomos pueden unirse, de acuerdo con sus valencias, en diferentes formas. Si un átomo de tipo i tiene la posibilidad de ligarse con otros átomos en L_i maneras diferentes, hay $L_i^{n_i}$ formas de enlace para ese tipo de átomos. El total de formas de ligaduras posibles para toda la célula será:

$$L = \prod_i L_i^{n_i} \tag{45}$$

Evidentemente, el número de estados de ligadura para una sola configuración es menor que L, pues no todas las formas de ligadura estadísticamente posibles son químicamente realizables, lo cual introduce restricciones en el número de arreglos. Las leyes químicas excluyen, como leyes naturales, un cierto número de estructuras (Capítulo II, 2).

Computando los estados posibles debidos a las distribuciones N_1 y los estados posibles debidos a los enlaces, tendremos en total $N_1 L = N_p$. Por las razones que acabamos de exponer, cabe afirmar que el número N de estados que puede adoptar el material de la célula es menor que $N_1 L$. Por consiguiente, escribiremos:

$$\log_2 N < \log_2 N_1 + \log_2 L \tag{46}$$

Con las fórmulas (44) y (45), obtenemos:

$$\log_2 N < \log_2 \frac{M\,!}{\prod_i n_i\,!} + \log_2 \prod L_i^{n_i} =$$

$$= \log_2 M\,! - \log_2 \prod_i n_i\,! + \log_2 (L_1^{n_1} L_2^{n_2} \ldots) =$$

$$= \log_2 M\,! - \log_2 (n_1\,! \, n_2\,! \, n_3\,! \ldots) + \log_2 L_1^{n_1} + \log_2 L_2^{n_2} + \ldots =$$

$$= \log_2 M\,! - (\log_2 n_1\,! + \log_2 n_2\,! + \log_2 n_3\,! + \ldots) +$$

$$+ n_1 \log_2 L_1 + n_2 \log_2 L_2 + \ldots \tag{47}$$

Por aplicación de la fórmula de Stirling a $\log_2 M\,!$ y $\log_2 n_i\,!$, resulta:

$$\log_2 N < M \log_2 M - \sum_i n_i \log_2 n_i + \sum_i n_i \log_2 L_i \tag{48}$$

b) *Aplicación*:

Morowitz (1955) lleva a cabo una aplicación numérica de la fórmula (48). Toma el caso general de un pequeño bacterio cuya

masa deshidratada es de $10^{-13}\,g$ y cuya composición química, en número de átomos, está consignada en la Tabla 2-*IV*. En este caso, los tipos de átomos son $i = 1, 2, 3, 4, 5, 6$, que corresponden a hidrógeno (H), oxígeno (O), carbono (C), nitrógeno (N), fósforo (P) y azufre (S).

TABLA 2-IV. — *Composición de un bacterio en número de átomos* (Morowitz, 1955)

H: $4{,}2 \times 10^9$	N: $6{,}1 \times 10^8$
O: $4{,}7 \times 10^8$	P: $2{,}3 \times 10^7$
C: $2{,}4 \times 10^9$	S: $1{,}3 \times 10^7$

Se considera la masa deshidratada porque, dice Morowitz, la investigación experimental conduce a admitir que la cantidad de información se halla contenida en la parte seca de la materia viviente y que es independiente de la temperatura. Esto es lo que se deduce de estudios hechos en *Bacillus subtilis*. Ya en el párrafo 2 de este capítulo ha sido utilizada la referencia a masa seca.

El cómputo de L_i se efectúa teniendo en cuenta que las celdas en que imaginamos dividido el bacterio son cúbicas, y que los átomos centrados en ellas pueden ligarse con cada uno de los átomos centrados en cada una de las seis celdas vecinas (Capítulo *V*, 1). Así resulta la Tabla 3-*IV*.

TABLA 3-IV. — *Número de enlace de los átomos H, O, C, N, P, S.* (Morowitz, 1955)

$L_H = 6$	$L_N = 56$
$L_O = 21$	$L_P = 252$
$L_C = 120$	$L_S = 21$

La aplicación de la fórmula (48) da:

$$I_E = 4{,}6 \times 10^{10} \left[\frac{\text{bit}}{10^{-13}\,g}\right] \tag{49}$$

Este es el máximo de información contenida en $10^{-13}\,g$ de material del bacterio bajo las condiciones impuestas por la teoría de Morowitz. Obsérvese, además, que, al deducir la fórmula (48), se ha supuesto que los estados son equiprobables, Seguramente esa hipótesis

no se cumple en la realidad biológica. Este argumento y los anteriores justifican el signo de desigualdad de la (48).

Veremos a continuación qué se obtiene si se procede a una estimación termodinámica del problema.

Ya hemos visto (Capítulo III) la relación existente entre entropía e información. Si escribimos la fórmula (9) del Capítulo III, 2, como incremento, tenemos:

$$\Delta\, S_0 = -\Delta\, I \,.\, R \log_e 2 \left[\frac{\text{cal}}{{}^\circ K\ \text{mol}}\right] \qquad (50)$$

Además

$$\Delta\, S_0 = \frac{\Delta\, Q_0}{T} \qquad (51)$$

De ambas expresiones, resulta:

$$\Delta\, Q_0 = -T \,.\, \Delta\, I \,.\, R \log_e 2 \left[\frac{\text{cal}}{\text{mol}}\right] \qquad (52)$$

Para un bacterio es:

$$\overline{\Delta\, Q_0} = -T \,.\, \Delta\, I \,.\, R \log_e 2 \left[\frac{\text{cal}}{N_A}\right] = -T \,.\, \Delta\, I \,.\, k \log_e 2\ [\text{cal}] \qquad (53)$$

En este cálculo se hace equivaler un bacterio a una molécula.

Se tiene datos experimentales sobre el calor disipado por bacterios (Calvet y Prat, 1956). Morowitz (1955) ha empleado los de Bayne-Jones y Rhees. (1929). Designaremos por $\overline{\Delta\, Q}$ el calor disipado por un bacterio, que se averigua experimentalmente. Dividido $\overline{\Delta\, Q}$ por la temperatura absoluta a la cual evoluciona el cultivo, resultará la entropía física real $\overline{\Delta\, S}$ por bacterio.

En el caso de *Bacillus coli,* por cada bacterio que se forma se produce, a 37,5 °C, un desprendimiento de calor:

$$\overline{\Delta\, Q} = 4 \times 10^{-10} \left[\frac{\text{cal}}{\text{germen}}\right] \qquad (54)$$

Si introducimos en la fórmula (53) el valor de $\Delta\, I$ consignado en la (49) y los valores $k = 0{,}32982 \times 10^{-23}$ [cal/°K] y $\log_e 2 = 0{,}643$, obtenemos:

$$\overline{\Delta\, Q_0} \cong 0{,}326 \times 10^{-10} \left[\frac{\text{cal}}{10^{-13}\ g}\right] \qquad (55)$$

Recordemos que este valor corresponde a un germen de $10^{-13}\ g$

Teniendo en cuenta qeu la masa de *Bacillus coli* es, aproximadamente, $4 \times 10^{-}$ g de peso seco, el valor $\overline{\Delta Q_0}$ calculado en base a la cantidad de información almacenada al constituirse un germen es:

$$\overline{\Delta Q_0} \cong 1{,}3 \times 10^{-10} \left[\frac{\text{cal}}{\text{germen}}\right] \tag{56}$$

Morowitz da, sin detallar sus cálculos numéricos:

$$\overline{\Delta Q_0} \cong 1{,}2 \times 10^{-10} \left[\frac{\text{cal}}{\text{germen}}\right] \tag{57}$$

Este valor representa un tercio, más o menos, del valor brindado por la investigación calorimétrica. Cabe admitir que la cantidad de información que puede almacenar *Bacillus coli* no sobrepasa al valor (54). Pensamos, dice Morowitz, que sólo una parte de la energía $\overline{\Delta Q}$ (probablemente un 30 %) corresponde a trabajo de organización del bacterio. El resto estaría relacionado con otros procesos (trabajo osmótico, metabolismo, etc.).

Si volvemos a la crítica hecha en la Sección 3 del Capítulo III, encontraremos lógico que el valor (57) resulte menor que el (54). Las consideraciones de Morowitz que acabamos de citar se concilian con las que sugieren los sistemas ilustrativos de válvulas y transitores comentados en aquel capítulo. El método mixto, que expondremos luego y que utiliza la entropía física real S, lleva a otro enfoque del problema del cálculo de la cantidad de información de una dada estructura química. En el Capítulo VI volveremos sobre este asunto.

c) *Correcciones.*

En los desarrollos matemáticos realizados en a) se ha admitido que la cantidad de información supera a la real. En esta sección consideraremos varias correcciones con el objeto de lograr la expresión (48) como igualdad.

Término $\log_2 N_f$. — No podemos saber cuál es el número N_f favorable a la producción de la estructura E. Se supone, lo que es lógico y natural, que es igual a uno, por lo menos. La expresión (48) de este párrafo brinda, así, un valor máximo, pues carece del término substrativo $\log_2 N_f$. Este cérmino mide el error que se comete al considerar N_f como unitario en caso de que, realmente, no lo sea. Expresaremos por

$$\varepsilon_f = \log_2 N_f \tag{58}$$

este error introducido en la estimación de los casos favorables.

Error en la estimación de las distribuciones y ligaduras reales. — Seguramente no todas las distribuciones N_1 de la fórmula (44) son físicamente realizables. Sólo ha de ocurrir un número de distribuciones N_1' menor que N_1, relacionado con éste por un fractor fraccionario, es decir:

$$N_1' = \nu N_1 \quad (\nu < 1) \tag{59}$$

Del mismo modo, hay que pensar que, desde el punto de vista químico, sólo es realizable un número L' de enlaces menor que L. Pondremos, pues,

$$L' = \mu L \quad (\mu < 1) \tag{60}$$

Por consiguiente, será:

$$\log_2 N_1' L' = \log_2 \nu + \log_2 N_1 + \log_2 \mu + \log_2 L \tag{61}$$

Denominaremos a $\log_2 \nu$ *error de estimación en las distribuciones* y a $\log_2 \mu$ *error de estimación en las ligaduras*, y escribiremos:

$$\left.\begin{aligned} \varepsilon_d &= \log_2 \nu \\ \varepsilon_l &= \log_2 \mu \end{aligned}\right\} \tag{62}$$

valores que habrán de resultar negativos, pues $\nu < 1$ y $\mu < 1$.

En base a estas consideraciones, como cantidad de información real, tendremos:

$$I_{real} = \log_2 N_1 + \log_2 L - \varepsilon_f + \varepsilon_d + \varepsilon_l \tag{63}$$

El miembro de la derecha de la desigualdad (46) expresa la cantidad de información máxima, que aceptamos como aproximada a la realidad. Pondremos:

$$I_{aprox} = \log_2 N_1 + \log_2 L \tag{64}$$

El error que se comete al tomar la (64) en lugar de la (69) es:

$$\varepsilon = I_{aprox} - I_{real} = \varepsilon_f - \varepsilon_d - \varepsilon_l \tag{65}$$

En otras palabras: podríamos decir que ε ocurre al introducirse la hipótesis de equiprobabilidad.

De la (65) obtenemos:

$$I_{real} = I_{aprox} - \varepsilon \tag{66}$$

Volviendo a las clases de información (II, 2) se ve inmediatamente que la I_{aprox} es la $I_{máx}$, ya que proviene de la hipótesis de la equipro-

babilidad; y que ε es la información interna I_i, por cuanto de la Fig. 2-II (a), sale:

$$I_i = I_{máx} - I_{real} = I_{aprox} - I_{real} = \varepsilon \quad (67)$$

5) Método mixto.

Con la denominación de *Método mixto* nos referimos al procedimiento que nosotros hemos usado, el cual consta de la aplicación del método de Morowitz a especies químicas definidas, el cálculo de la energía de formación y de la entropía de éstas, y, finalmente, la comparación entre las dos clases de resultados. De esta comparación derivan varios índices, de los cuales tratamos de deducir algunas consecuencias y aplicaciones.

En el capítulo siguiente exponemos detalladamente el desarrollo y la aplicación del *Método mixto*.

V. — METODO MIXTO Y SU APLICACION A ESPECIES QUIMICAS DEFINIDAS

Nos ocuparemos de la descripción del método propuesto en el Capítulo IV, Sección 5.

1. Cálculos probabilísticos

Aplicaremos la fórmula aproximada (48) del Capítulo IV a substancias químicamente definidas. Necesitamos determinar el número total de átomos M, el número n de átomos de clase i y el número de posibles ligaduras L para cada clase i de átomos. Todos los valores serán referidos al mol.

Sea un compuesto general, cuya fórmula bruta es:

$$A_a \; B_b \; C_c \quad (1)$$

constituido por a átomos del elemento químico A, b átomos del elemento B, c átomos del elemento C, etc. Para fijar ideas tomemos, por ejemplo, el alcohol metílico (Tabla 5-V). En este caso, tenemos:

$$A_a \; B_b \; C_c = CH_4O \quad (2)$$

donde:

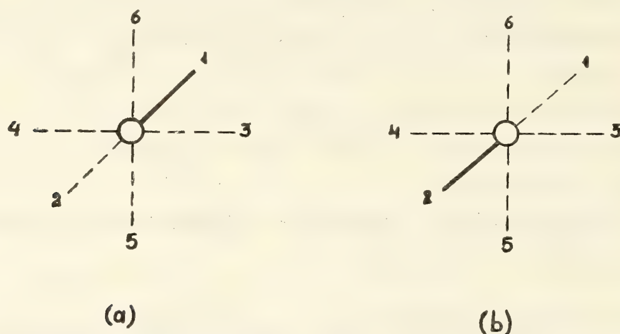
$$A = C \;\; ; \; a = 1$$

$$B = H \;\; ; \; b = 4$$

$$C = O \;\; ; \; c = 1$$

a) Lúmero L de posibles ligaduras para cada clase de átomos.

Supongamos un átomo monovalente ubicado en el centro de un cubo. Analizaremos las formas de vínculo del átomo con el cubo, utilizando, para tal fin, solamente las caras de este último. No tomamos en cuenta los vértices por cuanto están a mayor distancia del átomo que las caras.



IG. 1-V. — Los números indican las distintas caras del cubo en cuyo centro se ubica hipotética-mente al átomo. En (a) la ligadura está sobre la cara 1, y en (b) sobre la cara 2.

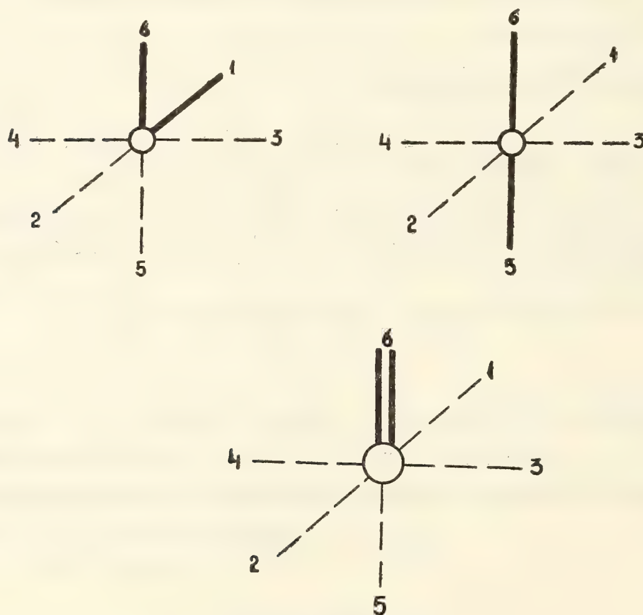


FIG. 2-V. — Atomo bivalente.

La única valencia existente puede dar ligaduras con la cara 1, 2, 3, 4, 5 ó 6 (Fig. 1-V).

En el caso de un átomo bivalente es fácil intuir que aumenta el número de posibilidades; las ligaduras pueden realizarse, por ejemplo, así: una ligadura sobre la cara 5 y otra sobre la 6; ambas ligaduras sorbe la cara 6; etc. (Fig. 2-V). Si se analiza todas las probabilidades, se ve que hay 21 ligaduras dstintas.

Con el mismo método empírico podemos llegar a determinar el número de formas de ligadura de un átomo trivalente (Fig. 3-V), de un átomo tetravalente (Fig. 3-V), etc. Naturalente que la labor se hace engorrosa.

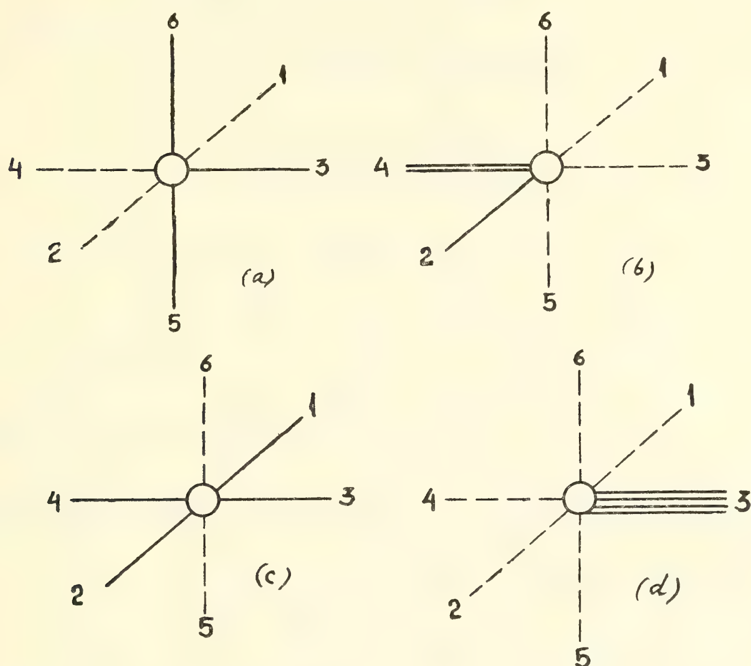


FIG. 3-V. — Atomo trivalente. En (a) las ligaduras se encuentran sobre las caras 3, 5 y 6; en (b) hay dos sobre 4 y una en 2. Atomo tetravalente; en (c) las ligaduras se hallan sobre 1, 2, 3 y 4, respectivamente; y en (d) se representan las cuatro en la cara 3.

Si se aplica el Análisis Combinatorio observamos que hay seis elementos distintos (las seis caras del cubo) y que las valencias son indiscriminables; luego, cuando dos o más ligaduras se realizan sobre una misma cara, equivale a una repetición del elemento (cara). Es decir, es posible suponer que se dispone de seis elementos (1, 2, 3, 4, 5, 6), los cuales se combinan en grupos de uno (átomo monovalente), de dos (átomo bivalente), de tres (átomo trivalente), etc., admitién-

dose la repetición de elementos. Esto se expresa, como es bien sabido, por la fórmula que da el número de combinaciones con repetición de n elementos tomados en grupos de r:

$$C'_{n,r} = \binom{n+r-1}{r} = \frac{(n+r-1)!}{r!\,(n-1)!} \tag{3}$$

Aplicando la (3) se obtiene los siguientes valores:

$$L_1 = C'_{6,1} = \frac{6!}{1!\;5!} = 6$$

$$L_2 = C'_{6,2} = \frac{7!}{2!\;5!} = 21$$

$$L_3 = C'_{6,3} = \frac{8!}{3!\;5!} = 56$$

$$L_4 = C'_{6,4} = \frac{9!}{4!\;5!} = 126$$

$$L_5 = C'_{6,5} = \frac{10!}{5!\;5!} = 252$$

$$L_6 = C'_{6,6} = \frac{11!}{6!\;5!} = 462$$

En las substancias objeto de nuestro cálculo intervienen elementos que son desde monovalentes hasta tetravalentes.

En el caso del alcohol metílico es:

$$L_C = L_4 = 126$$

$$L_H = L_1 = 6$$

$$L_O = L_2 = 21$$

b) Número N' de moléculas por cm^3

En un mol de substancia hay un número de moléculas que es el número de Avogadro N_A. En la cantidad de substancia existente en un cm^3, que está dada por la densidad δ, se tiene un número N' de moléculas que se deduce por regla de tres simple:

$$N' = \frac{N_A \cdot \delta}{P_M} \left[\frac{\text{molec}}{\text{cm}^3}\right] \tag{4}$$

Para el alcohol metilíco, resulta:

$$P_M = 32{,}04$$

$$\delta = 0{,}7928 \left[\frac{\text{g}}{\text{cm}^3}\right] \left(\begin{matrix} 20 \\ 4 \end{matrix}\right)$$

$$N' = \frac{6{,}06 \times 10^{23} \times 0{,}7928}{32{,}04} = 0{,}1499 \times 10^{23} \left[\frac{\text{moléc}}{\text{cm}^3}\right]$$

c) *Número de átomos* n_i *por* cm^3

Por ser N' el número de moléculas por cm^3 y a, b, $c\ldots$, el número de átomos en cada molécula, se tiene que:

$$n_A = a N' \left[\frac{\text{átomos del elemento A}}{\text{cm}^3}\right]$$

$$n_B = b N' \left[\frac{\text{átomos del elemento B}}{\text{cm}^3}\right]$$

$$n_C = c N' \left[\frac{\text{átomos del elemento C}}{\text{cm}^3}\right] \qquad (5)$$

. . . .

$(i = \text{A, B, C}, \ldots)$

En el ejemplo elegido es:

$$n_C = 0{,}1499 \times 10^{23} \left[\frac{\text{átomos de carbono}}{\text{cm}^3}\right]$$

$$n_H = 0{,}5996 \times 10^{23} \left[\frac{\text{átomos de hidrógeno}}{\text{cm}^3}\right]$$

$$n_O = 0{,}1499 \times 10^{23} \left[\frac{\text{átomos de oxígeno}}{\text{cm}^3}\right]$$

d) *Número total* M *de átomos por* cm^3.

Este valor es inmediato:

$$M = \sum_i n_i \qquad (6)$$

Para el alcohol metilíco, resulta:

$$M = n_C + n_H + n_O = 0{,}8994 \times 10^{23} \left[\frac{\text{átomos}}{\text{cm}^3}\right]$$

e) Cálculo de M log M, $\Sigma n_i \log n_i$ y $\Sigma n_i \log L_i$.

Estos valores numéricos se siguen fácilmente de las columnas (19) a (24) de la tabla de cálculo (Tabla 2-V).

Se tomó logaritmos en base 10, de manera que hechas las operaciones indicadas en las columnas (25) y (26), el resultado, que ya es la cantidad de información buscada I_E, está expresado en (Hartleys /cm^3) (II, 1, c). La columna (27) da la transformación a (bits/cm^3)

f) Número de bits por mol.

Dividiendo el número de (bits/cm^3) por la densidad en (g/cm^3), se obtiene el número de (bits/g); este último valor, multiplicado por el peso molecular tomado en g, proporciona la cantidad de información en (bits/mol):

$$I_E = \frac{\log_2 N}{\delta} P_M \left[\frac{\text{bit}}{\text{mol}}\right] \qquad (7)$$

Es lo que se indica en la columna (28) de la Tabla 2-V.

2. Calculos termoquimicos.

En esta sección consideraremos desde otro punto de vista las substancias químicas de las cuales estamos ocupándonos. Determinaremos, en primer lugar, su energía de formación, y, en segundo lugar, la variación de entropía que se produce al sintetizarse dichas substancias. El método de cálculo es aproximado, pero suficiente para el fin que perseguimos.

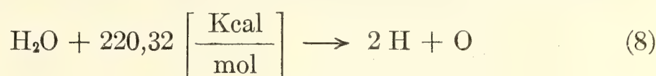
a) Método de cálculo de la energía de formación.

Consideraremos la energía de formación de las substancias a partir de los elementos componentes en estado atómico. Tomamos como base, especialmente, las reglas y datos mencionados por L. Pauling en su libro "The nature of the chemical bond" (1945).

La investigación termoquímica y espectroscópica permite deducir valores empíricos de la energía de ligadura. Para las moléculas poliatómicas, las medidas termoquímicas brindan un valor del calor total de disociación en átomos. Este valor, que designaremos por Q_E, traduce la energia necesaria para deshacer todos los enlaces existentes en la molécula. No se refiere a la energía de cada ligadura en particular.

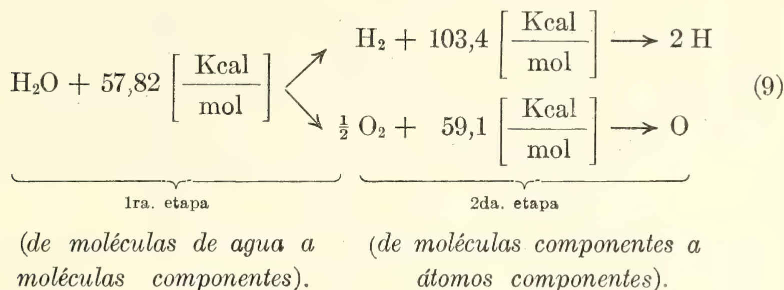
Tomemos, como ejemplo, la descomposición de la molécula de agua (en estado gaseoso) en sus átomos componentes. En una primera

etapa, la obtención del hidrógeno y del oxígeno al estado molecular requiere 57,82 [Kcal/mol] y, en una segunda etapa, la transformación de estos elementos al estado atómico, necesita 103,4 [Kcal/mol] para el hidrógeno, y 118,2 [Kcal/mol] para el oxígeno. Por lo tanto, la representación del proceso de descomposición del agua será:



$$H_2O + 220{,}32 \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mol}}\right] \longrightarrow 2\,H + O \qquad (8)$$

pues:

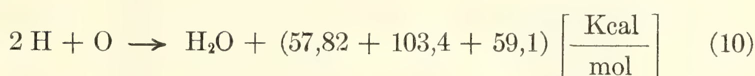


$$H_2O + 57{,}82 \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mol}}\right] \begin{cases} H_2 + 103{,}4 \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mol}}\right] \longrightarrow 2\,H \\ \frac{1}{2}\,O_2 + 59{,}1 \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mol}}\right] \longrightarrow O \end{cases} \qquad (9)$$

1ra. etapa — *(de moléculas de agua a moléculas componentes).*

2da. etapa — *(de moléculas componentes a átomos componentes).*

O sea:



$$2\,H + O \longrightarrow H_2O + (57{,}82 + 103{,}4 + 59{,}1) \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mol}}\right] \qquad (10)$$

Obsérvese que se computa la mitad de la energía de la reacción $O_2 \longrightarrow 2\,O$ (118,2/2 = 59,1) [Kcal/mol] porque interviene sólo media molécula.

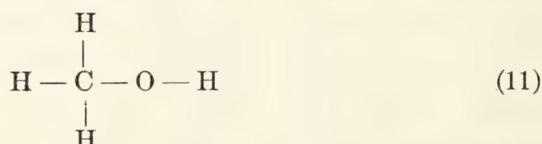
En total, ambas etapas necesitan la suma de los tres valores de energía, o sea 220,32 [Kcal/mol]. Tomado el proceso en sentido inverso, ésta *es la energía Q_E de formación del agua gaseosa a partir de los elementos en estado atómico.* La síntesis de un mol de agua se acompaña de la eliminación de 220,32 [Kcal/mol]. Señala Pauling que ésta es la suma de las cantidades de energía necesaria para arrancar sucesivamente los átomos de hidrógeno de la molécula de agua. En realidad, la energía para arrancar el primero no es igual a la energía para arrancar el segundo, pero no difieren mucho entre sí, así que es conveniente tomar su promedio, esto es, 220,32/2 = 110 [Kcal/mol] *como la energía de formación del enlace O — H.*

Con el criterio metodológico que acabamos de definir es posible atribuir energías de formación a las ligaduras entre diversos átomos. La Tabla 1-V contiene los valores que necesitaremos en nuestro trabajo.

TABLA 1-V. — *Energías de formación de algunas ligaduras químicas.*
(Pauling, 1945; Glasstone, 1947)

Ligadura	Energía [Kcal/mol]
H — H	103,4
Cl — Cl	57,8
F — F	63,5
I — I	36,2
Cl — H	102,7
F — H	147,5
I — H	71,4
I — Cl	51,0
Cl — Si	85,8
Cl — Ge	104,1
Br — As	48,0
C — C	58,6
C — H	87,3
C — O	70,0
C — S	54,5
N — N	20,0
N — H	83,7
N — C	48,6
O — H	110,2
C = C	100,0
O = O	96,0
C = O	149,0
C = N	94,0
C = S	103,0

Ejemplo: Sea el caso del alcohol metílico. Su fórmula desarrollada es:

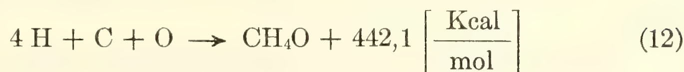


(11)

que contiene tres enlaces (H — C), uno (C — O) y uno (O — H). Con la Tabla 1-V obtenemos la energía de formación:

$$3\ (H - C) = 3 \times 87{,}3 = 261{,}9$$
$$(C - O) = 1 \times 70{,}0 = 70{,}0$$
$$(O - H) = 1 \times 110{,}2 = 110{,}2$$
$$442{,}1\ [Kcal/mol]$$

Entonces podemos escribir:



$$4\,H + C + O \rightarrow CH_4O + 442{,}1 \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mol}}\right] \qquad (12)$$

Con este procedimiento han sido calculadas las energías de formación consignadas en las tablas numeradas de 3 a 9 en este capítulo.

b) Variación de entropía.

Si consideramos sistemas como el (10), el tránsito del estado atómico inicial al estado molecular final se acompaña de un cambio de entropía ΔS, cuyo valor resulta de dividir la variación de energía por la temperatura a la cual tiene lugar el tránsito. Las energías de ligadura de la Tabla 1-V se refieren a la temperatura de 291° K (Pauling, 1945). Para los ejemplos mencionados tendremos:

$$\text{Agua: } \Delta S = -\frac{220{,}3}{291}\left[\frac{\text{Kcal/mol}}{{}^{\circ}\text{K}}\right] = -0{,}75\left[\frac{\text{Kcal}}{{}^{\circ}\text{K} \times \text{mol}}\right] \qquad (13)$$

$$\text{Alcohol metílico: } \Delta S = -\frac{442{,}1}{291}\left[\frac{\text{Kcal/mol}}{{}^{\circ}\text{K}}\right] = -1{,}51\left[\frac{\text{Kcal}}{{}^{\circ}\text{K} \times \text{mol}}\right] \qquad (14)$$

Las variaciones de entropía termodinámica de las tablas 3-V a 9-V han sido calculadas en esta forma.

La síntesis de una substancia involucra una disminución de su entropía respecto a la entropía de los elementos que la componen. Como es entropía que sale del sistema en que se produce el proceso sintetizante, hay un aumento de entropía en el entorno del sistema. Por eso le asignamos signo negativo, lo que se ve claramente por transposición del término termodinámico en las ecuaciones del tipo de la (10).

3. Relaciones.

Los cálculos probabilísticos explicados en la Sección 1 de este capítulo nos permiten obtener la cantidad de información que suministra el sistema al conformarse una determinada substancia (alcohol metílico, aminoácido, etc.). Remitimos el lector al cuadro conceptual del Capítulo III.

El contenido de información I_E de la estructura está dado en [bit/mol]: I_E [bit/mol]. Por otra parte, los cálculos termoquímicos de la sección anterior conducen a la variación de entropía termodinámica

de la substancia considerada. Llamémosla S_E (entropía de la estructura) y resulta en unidades entrópicas por mol de substancia: S_E [ue/mol].

I_E mide la cantidad de información en bits que adquiere un mol de masa al pasar del estado de desorganización al estado de organización para constituir una determinada substancia. Por la transformación vista en el Capítulo III, podemos expresarla en unidades entrópicas. Esta es, como dijimos en ese lugar, *entropía informacional o neguentropía.* Debemos cuidarnos de no confundirla con la *entropía física* o *termodinámica.* La misma entropía informacional, parámetro esencialmente intrínseco de la estructura, puede acompañarse de diferentes variaciones de entropía termodinámica según sea el nivel térmico en que actúa el acoplamiento de circuitos cibernéticos y la naturaleza de éstos, por lo que vimos en III,3.

Una vez obtenidos estos valores es posible hacer las siguientes relaciones:

a) Relación adimensional.

Transformamos I_E en unidades entrópicas por mol mediante el factor de conversión visto en el Capítulo III, 2, y obtenemos la neguentropía H_E:

$$I_E \left[\frac{\text{bit}}{\text{mol}}\right] \times \frac{1}{\alpha} \left[\frac{\text{ue}}{\text{bit}}\right] = H_E \left[\frac{\text{ue}}{\text{mol}}\right] \quad (15)$$

Dividimos ahora H_E por S_E:

$$\frac{H_E}{S_E} = \eta_1 \quad (16)$$

Llegamos así a un coeficiente a dimensional η_1 que mide un rendimiento de formación, el cual es siempre menor que la unidad.

O bien, transformamos S_E en unidades de información, mediante el factor α, y luego la relacionamos con I_E. Se obtiene:

$$S_E \left[\frac{\text{ue}}{\text{mol}}\right] \times \alpha \left[\frac{\text{bit}}{\text{ue}}\right] = J_E \left[\frac{\text{bit}}{\text{mol}}\right] \quad (17)$$

$$\frac{J_E}{I_E} = \eta_1' \quad (18)$$

b) Relación dimensional.

También es útil tomar $S_E \left[\frac{\text{ue}}{\text{mol}}\right]$ y dividirla por I_E [bit/mol]:

$$-\frac{S_E}{I_E} = \eta_2 \left[\frac{\text{ue}}{\text{bit}}\right] \tag{19}$$

Este factor tiene un significado más interesante: *da el número de unidades entrópicas necesarias para organizar un bit de información.*

c) Relación energética.

Por último, empleando el calor de formación Q_E, efectuamos la siguiente relación:

$$-\frac{Q_E\,[\text{Kcal/mol}]}{I_E\,[\text{bit/mol}]} = \eta_3 \left[\frac{\text{Kcal}}{\text{bit}}\right] \tag{20}$$

El factor η_3 proporciona *el número de calorías que disipa la estructura E cuando se organiza un bit de información.*

La recíproca de la relación (20) nos brinda otro enfoque de la cantidad de información en relación con la energía si la separamos en sus dos sumandos, esto es, el que corresponde a la información real y el que corresponde a la información interna [Fig. 2-11-(a)]. Resulta así:

$$\eta_3' = -\frac{I_E}{Q_E} = -\left(\frac{I_{real}}{Q_E} + \frac{I_i}{Q_E}\right) = \eta'_{real} + \eta'_i \tag{21}$$

4. Aplicaciones realizadas y comentarios.

Hemos aplicado el método mixto a compuestos inorgánicos y orgánicos; en total, sesenta y tres substancias.

En la Tabla 2-V damos una muestra del proceso de cálculo numérico.

Con los desarrollos ya dados anteriormente y las indicaciones que aparecen en esta tabla, es fácil entender su contenido. Para mayor claridad, en algunas columnas se señala qué operación se debe efectuar con los valores de otras columnas para obtener el resultado que se busca. Por ejemplo (13) por (14) en la (17) significa que los valores contenidos en ésta se logran multiplicando los de la (13) por los de la (14); en la (36), la indicación (31)/(28) significa que hay que dividir los valores de (31) por los de (28). Notemos que dicha tabla

TABLA 2-V. — *Muestra de la tabla de operaciones numéricas.*

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
Substancia	Fórmula química $A_a B_b C_c$	Densidad $\delta \left[\frac{g}{cm^3}\right]$	Peso molecular P_M	A	B	C	L_A	L_B	L_C	a	b	c	$N' = \frac{6,06 - 10^{23} \times \delta}{P_M}$ $\left[\frac{\text{moléculas}}{cm^3}\right]$
Glucosa	$C_6H_{12}O_6$	1,544 $\left[\frac{25}{4}\right]$	180,16	C	H	O	120	6	21	6	12	6	$0,0519 \times 10^{23}$

15	16	17	18	19	20	21	22	23
$n_A = N' \times a$ $\left[\frac{\text{átomos}}{cm^3}\right]$ (14) × (11)	$n_B = N' \times b$ $\left[\frac{\text{átomos}}{cm^3}\right]$ (14) × (12)	$n_C = N' \times c$ $\left[\frac{\text{átomos}}{cm^3}\right]$ (14) × (13)	$M = \Sigma n_i$ $(i = A, B, C)$ (15) × (16) × (17)	$\log_{10} M$	$M \log_{10} M$ (18) × (19)	$\log_{10} n_i$ $(i = A, B, C)$	$\Sigma n_i \log_{10} n_i$ $(i = A, B, C)$	$\log_{10} L_i$ $(i = A, B, C)$
			$0,3114 \times 10^{23}$			22,4933	$7,0044 \times 10^{23}$	2,0792
$0,3114 \times 10^{23}$	$0,6228 \times 10^{23}$	$0,3114 \times 10^{23}$	$0,6228 \times 10^{23}$	23,0952	$28,7674 \times 10^{23}$	22,7944	$14,1964 \times 10^{23}$	0,7782
			$0,3114 \times 10^{23}$			22,4933	$7,0044 \times 10^{23}$	1,3222
			$1,2456 \times 10^{23}$				$28,2052 \times 10^{23}$ (22)'	

TABLA 2-V. — (*Continuación*).

24	25	26	27	28	29
$\Sigma \eta_i \log_{10} L_i$ $(i = A, B, C)$	(20) + (24)′	(25) — (22)′ $\left[\frac{\text{Hartley}}{\text{cm}^3}\right]$	3,322 × (26) $\left[\frac{\text{bit}}{\text{cm}^3}\right]$	$I_E = \frac{P_M}{\delta} \times (27)$ $\left[\frac{\text{bit}}{\text{mol}}\right]$	I_E (28)/(4) $\left[\frac{\text{bit}}{\text{g}}\right]$
$0{,}6475 \times 10^{23}$					
$0{,}4847 \times 10^{23}$	$30{,}3133 \times 10^{23}$	$2{,}1061 \times 10^{23}$	$6{,}9965 \times 10^{23}$	$816{,}3791 \times 10^{-23}$	$4{,}53 \times 10^{-32}$
$0{,}4117 \times 10^{23}$					
$1{,}5439 \times 10^{23}$ (24)′					

30	31	32	33	34	35	36
$H_E = \frac{1}{\alpha} I_E =$ $0{,}229 \times 10^{-26} \times (28)$ $\left[\frac{\text{Kcal}}{°\text{K} \times \text{mol}}\right]$	Q_E $\left[\frac{\text{Kcal}}{\text{mol}}\right]$	$S_E = \frac{Q_E}{291}$ $\left[\frac{\text{Kcal}}{°\text{K} \times \text{mol}}\right]$	$\eta_1 = \frac{H_E}{S_E}$ (30)/(32)	η_1 ‰	$\eta_2 = \frac{S_E}{I_E}$ (32)/(28) $\left[\frac{\text{Kcal}}{°\text{K} \times \text{bit}}\right]$	$\eta_3 = \frac{Q_E}{I_E}$ (31)/(28) $\left[\frac{\text{Kcal}}{\text{bit}}\right]$
0,1870	1954,1	6,7151	0,0278	27,8	$0{,}0082 \times 10^{23}$	$2{,}3862 \times 10^{23}$

está preparada para compuestos de tres elementos (carbono, oxígeno, hidrógeno, por ejemplo). En caso de cuatro elementos (como los aminoácidos) o más elementos, es necesario introducir un correlativo número de columnas ampliatorias.

Los valores de la densidad han sido tomados del *Manual* de Hodgman (1945), salvo el caso de alguna substancia. Dichos valores aparecen expresados en gramos por centímetro cúbico, a la temperatura que se indica, para muchas substancias, en la parte superior del corchete colocado al lado del número. Cuando en la parte inferior del corchete hay una segunda temperatura, significa que la densidad es numéricamente equivalente al peso específico de la substancia tomado a la primera temperatura con respecto al agua a la segunda temperatura indicada (Mc Elvain, 1953). Si consignamos, por ejemplo, para el tetracloruro de germanio, el valor 1,879 $\left[\begin{matrix}20\\20\end{matrix}\right]$ quiere decir que la densidad es de 1,879 [g/cm^3], cosa equivalente al cociente entre su peso específico a 20° C y el peso específico del agua destilada también a 20° C. En otros términos, en un centímetro cúbico hay de Cl_4Ge 1,879 veces la cantidad de masa de agua existente en un cm^3, a las temperaturas referidas. En el caso del ácido heptanoico, el valor 0,9127 $\left[\begin{matrix}25\\4\end{matrix}\right]$ expresa que, en un centímetro cúbico y a 25° C, la masa de tal ácido es 0,9127 de la masa de agua contenida en un cm^3 a 4° C.

La densidad de los gases está referida a 0° C y a 760 mm Hg de presión, a menos que se indique otra cosa.

La temperatura del proceso de formación de cada substancia que deberíamos usar en la estimación de su entropía es la que queda fijada, de hecho, por la densidad, pues $\delta = \delta\ (T)$. Para todos, sin embargo, hemos aplicado 291° K, temperatura a la que están dadas las energías de formación de la Tabla 1-V. Puesto que las densidades de unas cuantas substancias se encuentran referidas a temperaturas diferentes, no hay uniformidad respecto a este parámetro, detalle que introduce una inhomogeneidad estadística en las estimaciones. Creemos, no obstante, que esto no afecta esencialmente los resultados finales, a causa de las diversas aproximaciones que contiene el método.

Debemos dejar constancia de que el cálculo combinatorio del número de ligaduras (V, 1, a) para el carbono da 126. Morowitz (Tabla 3-IV) consigna 120. Verificamos esta diferencia cuando ya estaban casi terminados nuestros cálculos numéricos con el uso de este último

valor. Consideramos que no valía la pena rehacerlos introduciendo el primero, por cuanto los resultados no serían apreciablemente diferentes.

Obsérvese que la fórmula de Morowitz [IV, (48)] se refiere a logaritmos en base 2 y que, en la Tabla 2-V, los cálculos se realizan con logaritmos en base 10. En la columna (27) se lleva a cabo la conversión a logaritmos en base 2.

Las tablas numeradas 3-V a 9-V contienen las substancias calculadas. Aparecen sólo los datos más importantes de la Tabla 2-V. En la base de las columnas de I_E, η_1, η_2, η_3 van los promedios aritméticos. La Tabla 10-V da los promedios aritméticos generales con los respectivos errores.

Señalamos que todos los isómeros de un compuesto aparecen con el mismo valor I_E. Para poner de manifiesto sus diferencias informacionales sería menester calcularles la información topológica (II, 2, c), referirla al mol o al gramo y sumársela a I_E, según el caso.

Las Fig. 4-V, 5-V y 6-V contienen la representación gráfica de los resultados.

Los valores de I_E, η_1, η_2 η_3 son mucho más regulares para los compuestos orgánicos que para los inorgánicos en el conjunto de los sesenta y tres substancias examinadas. Parece que sería interesante explorar la dispersión estadística de los parámetros antedichos en relación con algún parámetro ligado al número de ligaduras reales y el número de átomos de la molécula.

La acentuación de la regularidad de los valores mencionados a medida que aumenta la complejidad de la substancia autoriza a considerar como válido para todas las substancias orgánicas un valor $\bar{\eta}_2$ (media aritmética de los $\bar{\eta}_2$ hallados) y a aplicarlo con relativa seguridad a los cálculos biocalorimétricos que ensayamos en el Capítulo VI, en los cuales subyacen fenómenos de biosíntesis. Haremos el cálculo de $\bar{\bar{\eta}}_2$ en la siguiente sección.

5. ANÁLISIS ESTADÍSTICO.

Como decimos en la sección precedente, hemos calculado los promedios aritméticos y sus respectivos errores probables para cada grupo de substancias; luego han sido calculados los promedios de estos valores medios, excluyendo el I_E del hidrógeno, por ser muy desviado. Nuestros resultados valen dentro de las condiciones del muestreo que hemos usado. Nuevas investigaciones, teóricas y numéricas, más amplias y rigurosas, serán necesarias para afianzar, corregir o rechazar estos resultados.

TABLA 3-V. — *Sub*

				Cantidad de infor	
N°	Substancia	Dansidad δ [g/cm³]	Peso molecular P_M	I_E [bit/mol]	I_E [bit/g]
1	Hidrógeno	$0,0899 \times 10^{-3}$	2,0162	$35,8234 \times 10^{23}$	$17,76 \times 10^{23}$
2	Nitrógeno	$1,2506 \times 10^{-3}$ [°]	28,02	$69,4563 \times 10^{23}$	$2,47 \times 10^{23}$
3	Oxígeno..............	$1,4290 \times 10^{-3}$ [°]	32,00	$53,7438 \times 10^{23}$	$1,68 \times 10^{23}$
4	Flúor	$1,6900 \times 10^{-3}$ [15]	38,00	$29,2308 \times 10^{23}$	$0,76 \times 10^{23}$
5	Cloro	$3,2140 \times 10^{-3}$ [°]	70,91	$28,6817 \times 10^{23}$	$0,40 \times 10^{23}$
6	Yodo..................	4,93 [sólido]	253,84	$31,3361 \times 10^{23}$	$0,12 \times 10^{23}$
7	Acido fluorhídrico.....	$0,9210 \times 10^{-3}$	20,01	$43,4527 \times 10^{23}$	$2,17 \times 10^{23}$
8	Acido clorhídrico.......	$1,6390 \times 10^{-3}$ [°]	36,47	$69,0055 \times 10^{23}$	$1,89 \times 10^{23}$
9	Acido yodhídrico.......	$5,6600 \times 10^{-3}$ [°]	127,93	$42,9435 \times 10^{23}$	$0,33 \times 10^{23}$
10	Cloruro de Yodo.......	$3,1822 \times 10^{-3}$ [°]	162,38	$47,4555 \times 10^{23}$	0.29×10^{23}
11	Disulfuro de carbono...	1,261 $[^{22}_{20}]$ [líq.]	76,13	$107,7772 \times 10^{23}$	$1,41 \times 10^{23}$
12	Tribromuro de arsénico.	3,54 [25]	314,66	$101,8112 \times 10^{23}$	$0,32 \times 10^{23}$
13	Tetracloruro de germanio	1,879 $[^{20}_{20}]$ [líq.]	214,43	$126,3986 \times 10^{23}$	$0,58 \times 10^{23}$
14	Tetracloruro de silicio. .	1,483	169,89	$126,3080 \times 10^{23}$	$0,74 \times 10^{23}$
					$\overline{I}_E = 1,01 \times 10^{23}$*

* Excepto H_2.

TABLA 4-V.

				Cantidad de infor	
N°	Substancia	Densidad δ [g/cm³]	Peso moleular P_M	I_E [bit/mol]	I_E [bit/g]
1	Metanal	0,8150 $[^{20}_{4}]$	30,03	$100,9597 \times 10^{23}$	$3,36 \times 10^{23}$
2	Etanal	0,7834 $[^{18}_{4}]$	44,05	$229,1390 \times 10^{23}$	$5,20 \times 10^{23}$
3	Propanal ...	0,8070 $[^{20}_{4}]$	58,08	$324,6790 \times 10^{23}$	$5,59 \times 10^{23}$
4	Butanal	0,9230 $[^{20}_{4}]$	72,10	$416,5937 \times 10^{23}$	$5,77 \times 10^{23}$
5	Pentanal	0,8185 [11]	86,13	$670,4083 \times 10^{23}$	$7,81 \times 10^{23}$
6	Hexanal	0,8335 $[^{20}_{4}]$	100,16	$592,0911 \times 10^{23}$	$5,91 \times 10^{23}$
7	Heptanal ...	0,8500 $[^{20}_{4}]$	114,18	$587,6616 \times 10^{23}$	$5,14 \times 10^{23}$
8	Octanal	0,8210 $[^{20}_{4}]$	128,21	$782,5176 \times 10^{23}$	$6,10 \times 10^{23}$
9	Nonanal	0,8280 [20]	142,14	$864,6506 \times 10^{23}$	$6,08 \times 10^{23}$
10	Decanal	0,8280 $[^{15}_{4}]$	156,26	$924,4628 \times 10^{23}$	$5,91 \times 10^{23}$
					$\overline{I}_E = 5,68 \times 10^{23}$

tancias inorgánicas

mación	Valores termodinámicos		Relaciones		
$H_E = \frac{1}{\alpha} I_E$ [Kcal/°K × mol]	Q_E [Kcal/mol]	$S_E = \frac{Q_E}{291}$ [Kcal/°K×mol]	$\eta_1 = \frac{H_E}{S_E}$ ‰	$\eta_2 = \frac{S_E}{I_E}$ [Kcal/°K × bit]	$\eta_3 = \frac{Q_E}{I_E}$ [Kcal/bit]
$8{,}2173 \times 10^{-3}$	103,4	0,3553	23,1	$0{,}0099 \times 10^{-23}$	$2{,}8809 \times 10^{-23}$
$15{,}9055 \times 10^{-3}$	170,0	0,5842	27,2	$0{,}0084 \times 10^{-23}$	$2{,}4444 \times 10^{-23}$
$12{,}3073 \times 10^{-3}$	96,0	0,3299	37,3	$0{,}0061 \times 10^{-23}$	$1{,}7751 \times 10^{-23}$
$6{,}6939 \times 10^{-3}$	63,5	0,2182	30,7	$0{,}0075 \times 10^{-23}$	$2{,}1825 \times 10^{-23}$
$6{,}5681 \times 10^{-3}$	57,8	0,1986	33,1	$0{,}0069 \times 10^{-23}$	$2{,}0079 \times 10^{-23}$
$7{,}1760 \times 10^{-3}$	36,2	0,1244	57,6	$0{,}0040 \times 10^{-23}$	$1{,}1640 \times 10^{-23}$
$9{,}9507 \times 10^{-3}$	147,5	0,5069	19,6	$0{,}0117 \times 10^{-23}$	$3{,}4047 \times 10^{-23}$
$15{,}8023 \times 10^{-3}$	102,7	0,3529	44,7	$0{,}0057 \times 10^{-23}$	$1{,}6587 \times 10^{-23}$
$9{,}8341 \times 10^{-3}$	71,4	0,2454	40,1	$0{,}0057 \times 10^{-23}$	$1{,}6587 \times 10^{-23}$
$10{,}8673 \times 10^{-3}$	51,0	0,1753	62,0	$0{,}0037 \times 10^{-23}$	$1{,}0767 \times 10^{-23}$
$24{,}6810 \times 10^{-3}$	206,0	0,7079	34,9	$0{,}0066 \times 10^{-23}$	$1{,}9206 \times 10^{-23}$
$23{,}3148 \times 10^{-3}$	144,0	0,4948	47,1	$0{,}0049 \times 10^{-23}$	$2{,}8809 \times 10^{-23}$
$28{,}9453 \times 10^{-3}$	416,4	1,4309	20,2	$0{,}0113 \times 10^{-23}$	$3{,}2883 \times 10^{-23}$
$28{,}9245 \times 10^{-3}$	343,2	1,1793	24,5	$0{,}0093 \times 10^{-23}$	$2{,}7171 \times 10^{-23}$
			$\bar{\eta}_1 = 35{,}8$	$\bar{\eta}_2 = 0{,}0072 \times 10^{-23}$	$\bar{\eta}_3 = 2{,}0757 \times 10^{-23}$

— *Aldehidas.*

mación	Valores termodinámicos		Relaciones		
$H_E = \frac{1}{\alpha} I_E$ [Kcal/(°K×mol)]	Q_E [Kcal/mol]	$S_E = \frac{Q_E}{291}$ [Kcal/°K×mol]	$\eta_1 = \frac{H_E}{S_E}$ ‰	$\eta_2 = \frac{S_E}{I_E}$ [Kcal/°K×bit]	$\eta_3 = \frac{Q_E}{I_E}$ [Kcal/bit]
0,0231	324,6	1,1155	20,7	$0{,}0110 \times 10^{-23}$	$3{,}2010 \times 10^{-23}$
0,0524	556,8	1,9034	27,5	$0{,}0083 \times 10^{-23}$	$2{,}4153 \times 10^{-23}$
0,0744	790,0	2,7147	27,4	$0{,}0084 \times 10^{-23}$	$2{,}4444 \times 10^{-23}$
0,0954	1023,2	3,5161	27,1	$0{,}0084 \times 10^{-23}$	$2{,}4444 \times 10^{-23}$
0,1535	1256,4	4,3175	35,6	$0{,}0064 \times 10^{-23}$	$1{,}8624 \times 10^{-23}$
0,1356	1489,6	5,1189	26,5	$0{,}0086 \times 10^{-23}$	$2{,}5026 \times 10^{-23}$
0,1346	1722,8	5,9202	22,7	$0{,}0101 \times 10^{-23}$	$2{,}9391 \times 10^{-23}$
0,1792	1958,0	6,7285	26,7	$0{,}0086 \times 10^{-23}$	$2{,}5026 \times 10^{-23}$
0,1980	2189,2	7,5230	26,3	$0{,}0087 \times 10^{-23}$	$2{,}5318 \times 10^{-23}$
0,2117	2422,4	8,3243	25,4	$0{,}0090 \times 10^{-23}$	$2{,}6190 \times 10^{-23}$
			$\bar{\eta}_1 = 26{,}59$	$\bar{\eta}_2 = 0{,}0088 \times 10^{-23}$	$\bar{\eta}_3 = 2{,}5542 \times 10^{-23}$

TABLA 3-V. — *Substancias inorgánicas*

				Cantidad de información			Valores termodinámicos		Relaciones		
Nº	Substancia	Densidad δ [g/cm³]	Peso molecular P_M	I_E [bit/mol]	I_E [bit/g]	$H_E = \frac{1}{\alpha} I_E$ [Kcal/°K × mol]	Q_E [Kcal/mol]	$S_E = \frac{Q_E}{291}$ [Kcal/°K×mol]	$\eta_1 = \frac{H_E}{S_E}$ ‰	$\eta_2 = \frac{S_E}{I_E}$ [Kcal/°K × bit]	$\eta_3 = \frac{Q_E}{I_E}$ [Kcal/bit]
1	Hidrógeno	$0{,}0899 \times 10^{-3}$	2,0162	$35{,}8234 \times 10^{23}$	$17{,}76 \times 10^{23}$	$8{,}2173 \times 10^{-3}$	103,4	0,3553	23,1	$0{,}0099 \times 10^{-23}$	$2{,}8809 \times 10^{-23}$
2	Nitrógeno	$1{,}2506 \times 10^{-3}$ [°]	28,02	$69{,}4563 \times 10^{23}$	$2{,}47 \times 10^{23}$	$15{,}9055 \times 10^{-3}$	170,0	0,5842	27,2	$0{,}0084 \times 10^{-23}$	$2{,}4444 \times 10^{-23}$
3	Oxígeno	$1{,}4290 \times 10^{-3}$ [°]	32,00	$53{,}7438 \times 10^{23}$	$1{,}68 \times 10^{23}$	$12{,}3073 \times 10^{-3}$	96,0	0,3299	37,3	$0{,}0061 \times 10^{-23}$	$1{,}7751 \times 10^{-23}$
4	Flúor	$1{,}6900 \times 10^{-3}$ [15]	38,00	$29{,}2308 \times 10^{23}$	$0{,}76 \times 10^{23}$	$6{,}6939 \times 10^{-3}$	63,5	0,2182	30,7	$0{,}0075 \times 10^{-23}$	$2{,}1825 \times 10^{-23}$
5	Cloro	$3{,}2140 \times 10^{-3}$ [°]	70,91	$28{,}6817 \times 10^{23}$	$0{,}40 \times 10^{23}$	$6{,}5681 \times 10^{-3}$	57,8	0,1986	33,1	$0{,}0069 \times 10^{-23}$	$2{,}0079 \times 10^{-23}$
6	Yodo	4,93 [sólido]	253,84	$31{,}3361 \times 10^{23}$	$0{,}12 \times 10^{23}$	$7{,}1760 \times 10^{-3}$	36,2	0,1244	57,6	$0{,}0040 \times 10^{-23}$	$1{,}1640 \times 10^{-23}$
7	Acido fluorhídrico	$0{,}9210 \times 10^{-3}$	20,01	$43{,}4527 \times 10^{23}$	$2{,}17 \times 10^{23}$	$9{,}9507 \times 10^{-3}$	147,5	0,5069	19,6	$0{,}0117 \times 10^{-23}$	$3{,}4047 \times 10^{-23}$
8	Acido clorhídrico	$1{,}6390 \times 10^{-3}$ [°]	36,47	$69{,}0055 \times 10^{23}$	$1{,}89 \times 10^{23}$	$15{,}8023 \times 10^{-3}$	102,7	0,3529	44,7	$0{,}0057 \times 10^{-23}$	$1{,}6587 \times 10^{-23}$
9	Acido yodhídrico	$5{,}6600 \times 10^{-3}$ [°]	127,93	$42{,}9435 \times 10^{23}$	$0{,}33 \times 10^{23}$	$9{,}8341 \times 10^{-3}$	71,4	0,2454	40,1	$0{,}0057 \times 10^{-23}$	$1{,}6587 \times 10^{-23}$
10	Cloruro de Yodo	$3{,}1822 \times 10^{-3}$ [°]	162,38	$47{,}4555 \times 10^{23}$	$0{,}29 \times 10^{23}$	$10{,}8673 \times 10^{-3}$	51,0	0,1753	62,0	$0{,}0037 \times 10^{-23}$	$1{,}0767 \times 10^{-23}$
11	Disulfuro de carbono	1,261 $[^{22}_{20}]$ [líq.]	76,13	$107{,}7772 \times 10^{23}$	$1{,}41 \times 10^{23}$	$24{,}6810 \times 10^{-3}$	206,0	0,7079	34,9	$0{,}0066 \times 10^{-23}$	$1{,}9206 \times 10^{-23}$
12	Tribromuro de arsénico	3,54 $[^{25}]$	314,66	$101{,}8112 \times 10^{23}$	$0{,}32 \times 10^{23}$	$23{,}3148 \times 10^{-3}$	144,0	0,4948	47,1	$0{,}0049 \times 10^{-23}$	$2{,}8809 \times 10^{-23}$
13	Tetracloruro de germanio	1,879 $[^{20}_{20}]$ [líq.]	214,43	$126{,}3986 \times 10^{23}$	$0{,}58 \times 10^{23}$	$28{,}9453 \times 10^{-3}$	416,4	1,4309	20,2	$0{,}0113 \times 10^{-23}$	$3{,}2883 \times 10^{-23}$
14	Tetracloruro de silicio	1,483	169,89	$126{,}3080 \times 10^{23}$	$0{,}74 \times 10^{23}$	$28{,}9245 \times 10^{-3}$	343,2	1,1793	24,5	$0{,}0093 \times 10^{-23}$	$2{,}7171 \times 10^{-23}$
					$\bar{I}_E = 1{,}01 \times 10^{23}$*				$\bar{\eta}_1 = 35{,}8$	$\bar{\eta}_2 = 0{,}0072 \times 10^{-23}$	$\bar{\eta}_3 = 2{,}0757 \times 10^{-23}$

* Excepto H_2.

TABLA 4-V. — *Aldehidas.*

				Cantidad de información			Valores termodinámicos		Relaciones		
Nº	Substancia	Densidad δ [g/cm³]	Peso molecular P_M	I_E [bit/mol]	I_E [bit/g]	$H_E = \frac{1}{\alpha} I_E$ [Kcal/(°K × mol)]	Q_E [Kcal/mol]	$S_E = \frac{Q_E}{291}$ [Kcal/°K × mol]	$\eta_1 = \frac{H_E}{S_E}$ ‰	$\eta_2 = \frac{S_E}{I_E}$ [Kcal/°K × bit]	$\eta_3 = \frac{Q_E}{I_E}$ [Kcal/bit]
1	Metanal	0,8150 $[^{20}_{4}]$	30,03	$100{,}9597 \times 10^{23}$	$3{,}36 \times 10^{23}$	0,0231	324,6	1,1155	20,7	$0{,}0110 \times 10^{-23}$	$3{,}2010 \times 10^{-23}$
2	Etanal	0,7834 $[^{18}_{4}]$	44,05	$220{,}1390 \times 10^{23}$	$5{,}20 \times 10^{23}$	0,0524	556,8	1,9034	27,5	$0{,}0083 \times 10^{-23}$	$2{,}4153 \times 10^{-23}$
3	Propanal	0,8070 $[^{20}_{4}]$	58,08	$324{,}6790 \times 10^{23}$	$5{,}59 \times 10^{23}$	0,0744	790,0	2,7147	27,4	$0{,}0084 \times 10^{-23}$	$2{,}4444 \times 10^{-23}$
4	Butanal	0,9230 $[^{20}_{4}]$	72,10	$416{,}5937 \times 10^{23}$	$5{,}77 \times 10^{23}$	0,0954	1023,2	3,5161	27,1	$0{,}0084 \times 10^{-23}$	$2{,}4444 \times 10^{-23}$
5	Pentanal	0,8185 $[^{11}]$	86,13	$670{,}4083 \times 10^{23}$	$7{,}81 \times 10^{23}$	0,1535	1256,4	4,3175	35,6	$0{,}0064 \times 10^{-23}$	$1{,}8624 \times 10^{-23}$
6	Hexanal	0,8335 $[^{20}_{4}]$	100,16	$592{,}0911 \times 10^{23}$	$5{,}91 \times 10^{23}$	0,1356	1489,6	5,1189	26,5	$0{,}0086 \times 10^{-23}$	$2{,}5026 \times 10^{-23}$
7	Heptanal	0,8500 $[^{20}_{4}]$	114,18	$587{,}6616 \times 10^{23}$	$5{,}14 \times 10^{23}$	0,1346	1722,8	5,9202	22,7	$0{,}0101 \times 10^{-23}$	$2{,}9391 \times 10^{-23}$
8	Octanal	0,8210 $[^{20}_{4}]$	128,21	$782{,}5176 \times 10^{23}$	$6{,}10 \times 10^{23}$	0,1792	1958,0	6,7285	26,7	$0{,}0086 \times 10^{-23}$	$2{,}5026 \times 10^{-23}$
9	Nonanal	0,8280 $[^{20}]$	142,14	$864{,}6506 \times 10^{23}$	$6{,}08 \times 10^{23}$	0,1980	2189,2	7,5230	26,3	$0{,}0087 \times 10^{-23}$	$2{,}5318 \times 10^{-23}$
10	Decanal	0,8280 $[^{15}_{4}]$	156,26	$924{,}4628 \times 10^{23}$	$5{,}91 \times 10^{23}$	0,2117	2422,4	8,3243	25,4	$0{,}0090 \times 10^{-23}$	$2{,}6190 \times 10^{-23}$
					$\bar{I}_E = 5{,}68 \times 10^{23}$				$\bar{\eta}_1 = 26{,}59$	$\bar{\eta}_2 = 0{,}0088 \times 10^{-23}$	$\bar{\eta}_3 = 2{,}5542 \times 10^{-23}$

TABLA 5-V.

				Cantidad de infor	
Nº	Substancia	Densidad δ [g/cm³]	Peso molecular P_M	I_E [bit/mol]	I_E [bit/g]
1	Metílico	0,7928 $[^{20}_{4}]$	32,04	176,0800 $\times 10^{23}$	5,49 $\times 10^{23}$
2	Etílico	0,7893 $[^{20}_{4}]$	46,07	265,4200 $\times 10^{23}$	5,76 $\times 10^{23}$
3	Propílico	0,8044 $[^{20}_{4}]$	60,09	363,8717 $\times 10^{23}$	6,05 $\times 10^{23}$
4	Butílico	0,8097 $[^{20}_{4}]$	74,12	428,8869 $\times 10^{23}$	5,78 $\times 10^{23}$
5	Pentílico	0,8144 $[^{20}_{4}]$	88,15	536,3000 $\times 10^{23}$	6,08 $\times 10^{23}$
6	Hexílico	0,8186 $[^{20}_{4}]$	102,17	643,4000 $\times 10^{23}$	6,29 $\times 10^{23}$
7	Heptílico	0,8219 $[^{20}_{4}]$	116,20	715,3000 $\times 10^{23}$	6,15 $\times 10^{23}$
8	Octílico	0,8246 $[^{20}_{4}]$	130,23	821,1780 $\times 10^{23}$	6,30 $\times 10^{23}$
9	Nonílico	0,8274 $[^{20}_{4}]$	144,25	912,2540 $\times 10^{23}$	6,32 $\times 10^{23}$
10	Decílico	0,8292 $[^{20}_{4}]$	158,28	1002,3300 $\times 10^{23}$	6,33 $\times 10^{23}$
11	Etanodiol (glicol)	1,1155 $[^{20}_{4}]$	62,07	344,0788 $\times 10^{23}$	5,54 $\times 10^{23}$
12	Propanotriol (glicerol) ..	1,2600 $[^{20}_{4}]$	92,09	450,5833 $\times 10^{23}$	4,89 $\times 10^{23}$
13	Tetrol (eritrita)	1,4510 $[^{20}_{4}]$	122,12	587,1103 $\times 10^{23}$	4,80 $\times 10^{23}$
14	Hexol (manita, dulcita)	1,4660 $[^{15}_{4}]$	182,17	872,0054 $\times 10^{23}$	4,78 $\times 10^{23}$
					$\bar{I}_E = 5,75 \times 10^{23}$

TABLA 6-V. —

				Cantidad de infor	
Nº	Substancia	Densidad δ [g/cm³]	Peso molecular P_M	I_E [bit/mol]	I_E [bit/g]
1	Metanoico ..	1,220 $[^{20}_{4}]$	46,03	172,7144 $\times 10^{23}$	3,75 $\times 10^{23}$
2	Etanoico ...	1,049 $[^{20}_{4}]$	60,05	272,4347 $\times 10^{23}$	4,53 $\times 10^{23}$
3	Propanoico .	0,992	74,08	366,0911 $\times 10^{23}$	4,94 $\times 10^{23}$
4	Butanoico...	0,9587 $[^{20}_{4}]$	88,10	462,6743 $\times 10^{23}$	5,25 $\times 10^{23}$
5	Pentanoico .	0,9420 $[^{20}_{4}]$	102,13	551,9899 $\times 10^{-23}$	5,40 $\times 10^{23}$
6	Hexanoico..	0,9450 $[^{0}_{0}]$	116,16	649,4265 $\times 10^{-23}$	5,58 $\times 10^{23}$
7	Heptanoico.	0,9127 $[^{25}_{4}]$	130,18	742,0559 $\times 10^{23}$	5,70 $\times 10^{23}$
8	Octanoico ..	0,9100 $[^{20}_{24}]$	144,21	832,9949 $\times 10^{23}$	5,78 $\times 10^{23}$
9	Nonanoico..	0,9055 $[^{20}_{4}]$	158,24	926,4075 $\times 10^{23}$	5,22 $\times 10^{23}$
10	Decanoico..	0,8858 $[^{40}_{4}]$	172,26	1018,7220 $\times 10^{23}$	5,91 $\times 10^{23}$
					$\bar{I}_E = 5,20 \times 10^{23}$

— *Alcoholes*

mación	Valores termodinámicos		Relaciones		
$H_E = \frac{1}{\alpha} I_E$ [Kcal/°K × mol]	Q_E [Kcal/mol]	$S_E = \frac{Q_E}{291}$ [Kcal/°K×mol]	$\eta_1 = \frac{H_E}{S_E}$ °/oo	$\eta_2 = \frac{S_E}{I_E}$ [Kcal/°K × bit]	$\eta_3 = \frac{Q_E}{I_E}$ [Kcal/bit]
0,0403	442,1	1,5270	26,4	$0{,}0087 \times 10^{-23}$	$2{,}5317 \times 10^{-23}$
0,0608	675,3	2,3196	26,2	$0{,}0087 \times 10^{-23}$	$2{,}5317 \times 10^{-23}$
0,0833	908,5	3,1220	26,7	$0{,}0086 \times 10^{-23}$	$2{,}5026 \times 10^{-23}$
0,0982	1141,7	3,9234	25,0	$0{,}0091 \times 10^{-23}$	$2{,}6481 \times 10^{-23}$
0,1229	1374,9	4,7247	26,0	$0{,}0088 \times 10^{-23}$	$2{,}5608 \times 10^{-23}$
0,1473	1608,1	5,5261	26,7	$0{,}0086 \times 10^{-23}$	$2{,}5026 \times 10^{-23}$
0,1640	1841,3	6,3274	25,9	$0{,}0088 \times 10^{-23}$	$2{,}5608 \times 10^{-23}$
0,1880	2074,5	7,1288	26,4	$0{,}0087 \times 10^{-23}$	$2{,}5317 \times 10^{-23}$
0,2090	2307,7	7,9302	26,4	$0{,}0087 \times 10^{-23}$	$2{,}5317 \times 10^{-23}$
0,2290	2540,9	8,7316	26,2	$0{,}0085 \times 10^{-23}$	$2{,}4735 \times 10^{-23}$
0,0788	768,2	2,6399	29,8	$0{,}0076 \times 10^{-23}$	$2{,}2116 \times 10^{-23}$
0,1032	1093,7	3,7584	27,5	$0{,}0083 \times 10^{-23}$	$2{,}4153 \times 10^{-23}$
0,1344	1420,4	4,8811	27,5	$0{,}0083 \times 10^{-23}$	$2{,}4153 \times 10^{-23}$
0,1997	2072,6	7,1223	28,0	$0{,}0082 \times 10^{-23}$	$2{,}3862 \times 10^{-23}$
			$\bar{\eta}_1 = 26{,}8$	$\bar{\eta}_2 = 0{,}0086 \times 10^{-23}$	$\bar{\eta}_2 = 2{,}4859 \times 10^{-23}$

Acidos orgánicos.

mación	Valores termodinámicos		Relaciones		
$H_E = \frac{1}{\alpha} I_E$ [Kcal/°K mol]	Q_E [Kcal/mol]	$S_E = \frac{Q_E}{291}$ [Kcal/°K×mol]	$\eta_1 = \frac{H_E}{S_E}$ °/oo	$\eta_2 = \frac{S_E}{I_E}$ [Kcal/°K × bit]	$\eta_3 = \frac{Q_E}{I_E}$ [Kcal/bit]
0,0396	416,5	1,4313	27,7	$0{,}0083 \times 10^{-23}$	$2{,}4153 \times 10^{-23}$
0,0624	649,7	2,2326	27,9	$0{,}0082 \times 10^{-23}$	$2{,}3862 \times 10^{-23}$
0,0838	882,9	3,0340	27,6	$0{,}0082 \times 10^{-23}$	$2{,}4153 \times 10^{-23}$
0,1060	1116,10	3,8354	27,6	$0{,}0083 \times 10^{-23}$	$2{,}4153 \times 10^{-23}$
0,1264	1349,3	4,6368	27,3	$0{,}0084 \times 10^{-23}$	$2{,}4444 \times 10^{-23}$
0.1487	1582,5	5,4381	27,3	$0{,}0084 \times 10^{-23}$	$2{,}4444 \times 10^{-23}$
0,1699	1903,0	6,5395	26,0	$0{,}0088 \times 10^{-23}$	$2{,}5608 \times 10^{-23}$
0,1908	2048,9	7,0409	27,1	$0{,}0085 \times 10^{-23}$	2.4735×10^{-23}
0,2121	2282,1	7,8423	27,0	$0{,}0085 \times 10^{-23}$	$2{,}4735 \times 11^{-23}$
0,2332	2515,1	8,6430	27,0	$0{,}0085 \times 10^{-23}$	$2{,}4735 \times 10^{-23}$
			$\bar{\eta}_1 = 27{,}25$	$\bar{\eta}_2 = 0{,}0084 \times 10^{-23}$	$\bar{\eta}_3 = 2{,}4500 \times 10^{-23}$

TABLA 5-V.

				Cantidad de infor	
Nº	Substancia	Densidad δ [g/cm³]	Peso molecular P_M	I_E [bit/mol]	I_E [bit/g]
1	Metílico	0,7928 $[^{20}_{4}]$	32,04	$176,0800 \times 10^{23}$	$5,49 \times 10^{23}$
2	Etílico	0,7893 $[^{20}_{4}]$	46,07	$265,4200 \times 10^{23}$	$5,76 \times 10^{23}$
3	Propílico	0,8044 $[^{20}_{4}]$	60,09	$363,8717 \times 10^{23}$	$6,05 \times 10^{23}$
4	Butílico	0,8097 $[^{20}_{4}]$	74,12	$428,8869 \times 10^{23}$	$5,78 \times 10^{23}$
5	Pentílico	0,8144 $[^{20}_{4}]$	88,15	$536,3000 \times 10^{23}$	$6,08 \times 10^{23}$
6	Hexílico	0,8186 $[^{20}_{4}]$	102,17	$643,4000 \times 10^{23}$	$6,29 \times 10^{23}$
7	Heptílico	0,8219 $[^{20}_{4}]$	116,20	$715,3000 \times 10^{23}$	$6,15 \times 10^{23}$
8	Octílico	0,8246 $[^{20}_{4}]$	130,23	$821,1780 \times 10^{23}$	$6,30 \times 10^{23}$
9	Nonílico	0,8274 $[^{20}_{4}]$	144,25	$912,2540 \times 10^{23}$	$6,32 \times 10^{23}$
10	Decílico	0,8292 $[^{20}_{4}]$	158,28	$1002,3300 \times 10^{23}$	$6,33 \times 10^{23}$
11	Etanodiol (glicol)	1,1155 $[^{20}_{4}]$	62,07	$344,0788 \times 10^{23}$	$5,54 \times 10^{23}$
12	Propanotriol (glicerol) ..	1,2600 $[^{20}_{4}]$	92,09	$450,5833 \times 10^{23}$	$4,89 \times 10^{23}$
13	Tetrol (eritrita)	1,4510 $[^{20}_{4}]$	122,12	$587,1103 \times 10^{23}$	$4,80 \times 10^{23}$
14	Hexol (manita, dulcita)	1,4660 $[^{15}_{4}]$	182,17	$872,0054 \times 10^{23}$	$4,78 \times 10^{23}$
					$\overline{I}_E = 5,75 \times 10^{23}$

TABLA 6-V. —

				Cantidad de infor	
Nº	Substancia	Densidad δ [g/cm³]	Peso molecular P_M	I_E [bit/mol]	I_E [bit/g]
1	Metanoico ..	1,220 $[^{20}_{4}]$	46,03	$172,7144 \times 10^{23}$	$3,75 \times 10^{23}$
2	Etanoico ...	1,049 $[^{20}_{4}]$	60,05	$272,4347 \times 10^{23}$	$4,53 \times 10^{23}$
3	Propanoico .	0,992	74,08	$366,0911 \times 10^{23}$	$4,94 \times 10^{23}$
4	Butanoico...	0,9587 $[^{20}_{4}]$	88,10	$462,6743 \times 10^{23}$	$5,25 \times 10^{23}$
5	Pentanoico .	0,9420 $[^{20}_{4}]$	102,13	$551,9899 \times 10^{-23}$	$5,40 \times 10^{23}$
6	Hexanoico..	0,9450 $[^{0}_{0}]$	116,16	$649,4265 \times 10^{-23}$	$5,58 \times 10^{23}$
7	Heptanoico.	0,9127 $[^{25}_{4}]$	130,18	$742,0559 \times 10^{23}$	$5,70 \times 10^{23}$
8	Octanoico ..	0,9100 $[^{20}_{24}]$	144,21	$832,9949 \times 10^{23}$	$5,78 \times 10^{23}$
9	Nonanoico..	0,9055 $[^{20}_{4}]$	158,24	$926,4075 \times 10^{23}$	$5,22 \times 10^{23}$
10	Decanoico..	0,8858 $[^{40}_{4}]$	172,26	$1018,7220 \times 10^{23}$	$5,91 \times 10^{23}$
					$\overline{I}_E = 5,20 \times 10^{23}$

— *Alcoholes*

mación	Valores termodinámicos		Relaciones		
$H_E = \frac{1}{\alpha} I_E$ [Kcal/°K × mol]	Q_E [Kcal/mol]	$S_E = \frac{Q_E}{291}$ [Kcal/°K×mol]	$\eta_1 = \frac{H_E}{S_E}$ °/₀₀	$\eta_2 = \frac{S_E}{I_E}$ [Kcal/°K × bit]	$\eta_3 = \frac{Q_E}{I_E}$ [Kcal/bit]
0,0403	442,1	1,5270	26,4	$0,0087 \times 10^{-23}$	$2,5317 \times 10^{-23}$
0,0608	675,3	2,3196	26,2	$0,0087 \times 10^{-23}$	$2,5317 \times 10^{-23}$
0,0833	908,5	3,1220	26,7	$0,0086 \times 10^{-23}$	$2,5026 \times 10^{-23}$
0,0982	1141,7	3,9234	25,0	$0,0091 \times 10^{-23}$	$2,6481 \times 10^{-23}$
0,1229	1374,9	4,7247	26,0	$0,0088 \times 10^{-23}$	$2,5608 \times 10^{-23}$
0,1473	1608,1	5,5261	26,7	$0,0086 \times 10^{-23}$	$2,5026 \times 10^{-23}$
0,1640	1841,3	6,3274	25,9	$0,0088 \times 10^{-23}$	$2,5608 \times 10^{-23}$
0,1880	2074,5	7,1288	26,4	$0,0087 \times 10^{-23}$	$2,5317 \times 10^{-23}$
0,2090	2307,7	7,9302	26,4	$0,0087 \times 10^{-23}$	$2,5317 \times 10^{-23}$
0,2290	2540,9	8,7316	26,2	$0,0085 \times 10^{-23}$	$2,4735 \times 10^{-23}$
0,0788	768,2	2,6399	29,8	$0,0076 \times 10^{-23}$	$2,2116 \times 10^{-23}$
0,1032	1093,7	3,7584	27,5	$0,0083 \times 10^{-23}$	$2,4153 \times 10^{-23}$
0,1344	1420,4	4,8811	27,5	$0,0083 \times 10^{-23}$	$2,4153 \times 10^{-23}$
0,1997	2072,6	7,1223	28,0	$0,0082 \times 10^{-23}$	$2,3862 \times 10^{-23}$
			$\overline{\eta}_1 = 26,8$	$\overline{\eta}_2 = 0,0086 \times 10^{-23}$	$\overline{\eta}_2 = 2,4859 \times 10^{-23}$

Acidos orgánicos.

mación	Valores termodinámicos		Relaciones		
$H_E = \frac{1}{\alpha} I_E$ [Kcal/°K·mol]	Q_E [Kcal/mol]	$S_E = \frac{Q_E}{291}$ [Kcal/°K×mol]	$\eta_1 = \frac{H_E}{S_E}$ °/₀₀	$\eta_2 = \frac{S_E}{I_E}$ [Kcal/°K × bit]	$\eta_3 = \frac{Q_E}{I_E}$ [Kcal/bit]
0,0396	416,5	1,4313	27,7	$0,0083 \times 10^{-23}$	$2,4153 \times 10^{-23}$
0,0624	649,7	2,2326	27,9	$0,0082 \times 10^{-23}$	$2,3862 \times 10^{-23}$
0,0838	882,9	3,0340	27,6	$0,0082 \times 10^{-23}$	$2,4153 \times 10^{-23}$
0,1060	1116,10	3,8354	27,6	$0,0083 \times 10^{-23}$	$2,4153 \times 10^{-23}$
0,1264	1349,3	4,6368	27,3	$0,0084 \times 10^{-23}$	$2,4444 \times 10^{-23}$
0.1487	1582,5	5,4381	27,3	$0,0084 \times 10^{-23}$	$2,4444 \times 10^{-23}$
0,1699	1903,0	6,5395	26,0	$0,0088 \times 10^{-23}$	$2,5608 \times 10^{-23}$
0,1908	2048,9	7,0409	27,1	$0,0085 \times 10^{-23}$	2.4735×10^{-23}
0,2121	2282,1	7,8423	27,0	$0,0085 \times 10^{-23}$	$2,4735 \times 11^{-23}$
0,2332	2515,1	8,6430	27,0	$0,0085 \times 10^{-23}$	$2,4735 \times 10^{-23}$
			$\overline{\eta}_1 = 27,25$	$\overline{\eta}_2 = 0,0084 \times 10^{-23}$	$\overline{\eta}_2 = 2,4500 \times 10^{-23}$

La Tabla 10-V resume los valores de los promedios, los errores probables y las desviaciones normales de los siete grupos de substancias. El número entre paréntesis al lado del número de la tabla, en la segunda columna, indica cuántas substancias constituyen esta tabla. Por ejemplo: 5-V (14) significa que la Tabla 5-V está compuesta por 14 substancias. La Tabla 3-V tiene dos números entre paréntesis, pues, para el cálculo de $\overline{I}_E$, E y s, se eliminó el hidrógeno, como dijimos recién. Se tiene, entonces, $N = 13$; pero para η_1, η_2 y η_3 se lo conservó, de modo que es $N = 14$ para estos parámetros.

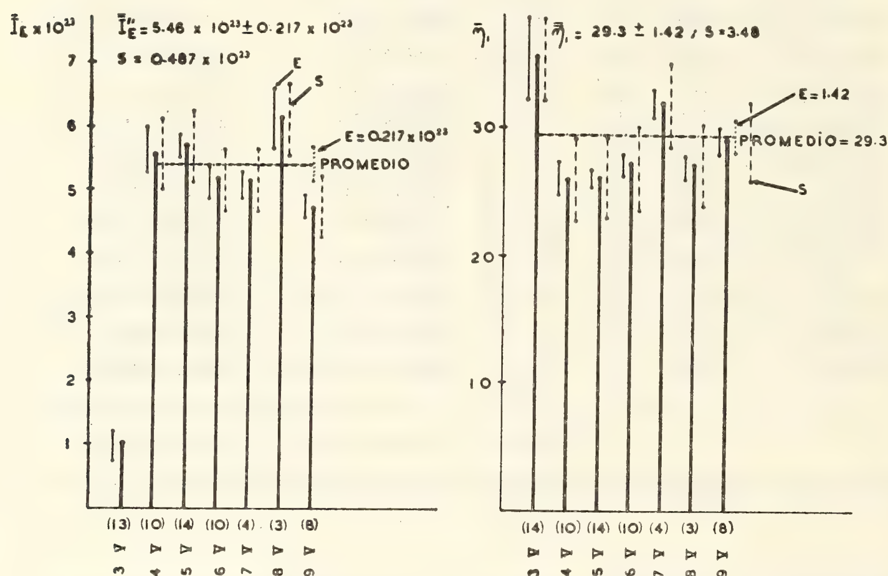


Fig. 4-V. — Corresponde a la Tabla 10-V.

El examen de la Tabla 10-V lleva a algunas observaciones. Los valores de $\overline{I}_E$ son bastante similares, excepto el primero (Tabla 3-V). Las dispersiones son aceptablemente parejas, pero llama la atención que la dispersión de 4-V sea mayor que la de 3-V. Obsérvese que las dispersiones de 4-V (aldehidas) siempre son mayores, salvo en η_1 y η_3, donde las s de las aldehidas ocupa el segundo lugar.

Los valores de $\overline{\eta}_1$ son también aceptables. Sus dispersiones son similares, menos para las aldehidas y las substancias inorgánicas.

El gráfico de la Fig. 4-V representa los valores de $\overline{I}_E$ (promedios de las tablas, en ordenadas; y, en abscisas, arbitrariamente, las tablas). Cada promedio $\overline{I}_E$ lleva indicado en línea llena su error probable (E) y, en línea punteada, la desviación normal del conjunto

de promedios ($s = 0{,}487 \times 10^{23}$). La línea punteada horizontal es el promedio general $\overline{\overline{I}}_E$ con su $E = 0{,}217 \times 10^{2?}$.

El gráfico de la Fig. 4-V también representa los promedios $\overline{\eta}_1$. Cada promedio tiene indicado, en línea llena, su correspondiente E y, en línea punteada, la desviación normal del conjunto de promedios. La línea punteada horizontal es $\overline{\overline{\eta}}_1$, con su error probable, también en línea punteada.

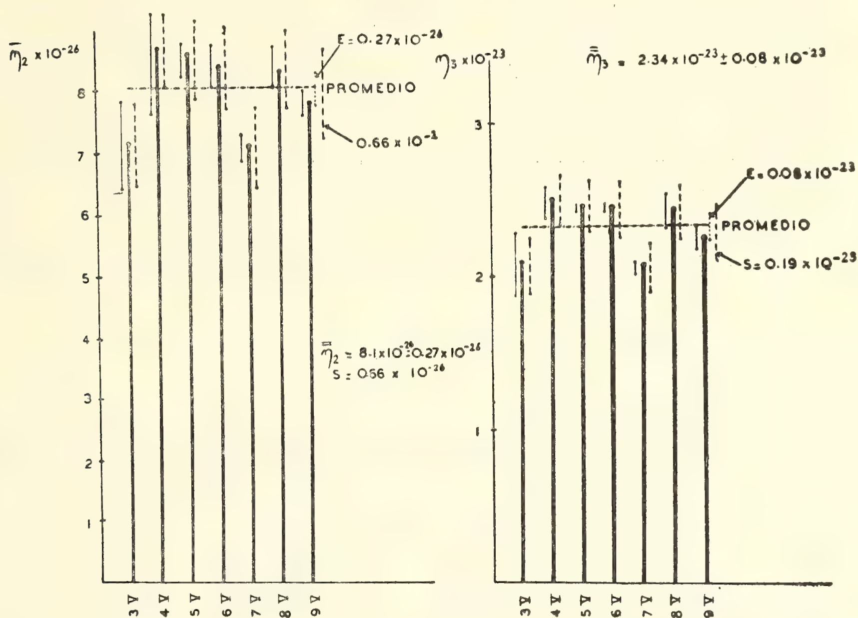


FIG. 5-V. — Corresponde a la Tabla 10-V.

El gráfico de la Fig. 5-V es similar al anterior .Muestra los promedios $\overline{\eta}_2$, $\overline{\eta}_3$, $\overline{\overline{\eta}}_2$, $\overline{\overline{\eta}}_3$.

Las desviaciones normales han sido calculadas con la expresión

$$s^2 = \frac{\Sigma x_i^2 - \dfrac{(\Sigma x_i)^2}{N}}{N-1} \tag{22}$$

para evitar las diferencias $(x_i - \overline{x})$. El error probable de la media ha sido obtenido con la expresión

$$E = \frac{s}{\sqrt{N-1}} \tag{23}$$

TABLA 7-V. —

				Cantidad de info	
N°	Substancia	Densidad δ [g/cm³]	Peso molecular P_M	I_E [bit/mol]	I_E [bit/g]
1	Aminoetanoico (glicina)...	1,607 [sólido]	75,07	$357,2340 \times 10^{23}$	$4,75 \times 10^{23}$
2	Aminopropanoico(alanina)	1,404	89,09	$455,1076 \times 10^{23}$	$5,10 \times 10^{23}$
3	Aminobutanoico.........	1,231	103,12	$547,4825 \times 10^{23}$	$5,30 \times 10^{23}$
4	Aminohexanoico.........	1,169	131,17	$740,0950 \times 10^{23}$	$5,64 \times 10^{23}$
					$\overline{I_E} = 5,19 \times 10^{23}$

TABLA 8-V. —

				Cantidad de infor	
N°	Substancia	Densidad δ [g/cm³]	Peso molecular P_M	I_E [bit/mol]	I_E [bit/g]
1	Palmitina	0,860 $\left[\frac{80}{4}\right]$	807,30	$4887,7020 \times 10^{23}$	$6,05 \times 10^{23}$
2	Estearina	0,862 $\left[\frac{80}{4}\right]$	891,46	$5378,0278 \times 10^{23}$	$6,03 \times 10^{23}$
3	Oleína (no saturada)	0,915 $\left[\frac{20}{4}\right]$	885,41	$5637,1100 \times 10^{23}$	$6,36 \times 10^{23}$
					$\overline{I_E} = 6,14 \times 10^{23}$

Aminoácidos

mación	Valores termodinámicos		Relaciones		
$H_E = \frac{1}{\alpha} I_E$ [Kcal/°K mol]	Q_E [Kcal/mol	$S_E = \frac{Q_E}{291}$ [Kcal/°K × mol]	$\eta_1 = \frac{H_E}{S_E}$ ‰	$\eta_2 = \frac{S_E}{I_E}$ [Kcal/°K × bit]	$\eta_3 = \frac{Q_E}{I_E}$ [Kcal/bit]
$81,8066 \times 10^{-3}$	694,7	2,3873	34,3	$0,0067 \times 10^{-23}$	1.9497×10^{-23}
$104,2196 \times 10^{-3}$	927,9	3,1887	32,7	$0,0070 \times 10^{-23}$	$2,0370 \times 10^{-23}$
$125,3735 \times 10^{-3}$	1161,1	3,9900	31,4	$0,0073 \times 10^{-23}$	$2,1243 \times 10^{-23}$
$169,4818 \times 10^{-3}$	1627,5	5,5927	30,3	$0,0075 \times 10^{-23}$	$2,1825 \times 10^{-23}$
			$\bar{\eta}_1 = 32,17$	$\bar{\eta}_2 = 0,0071 \times 10^{-23}$	$\bar{\eta}_3 = 2,0736 \times 10^{-23}$

Substancias grasas.

mación	Valores termodinámicos		Relaciones		
$H_E = \frac{1}{\alpha} I_E$ [Kcal/°K × mol]	Q_E [Kcal/mol]	$S_E = \frac{Q_E}{291}$ [Kcal/°K×mol]	$\eta_1 = \frac{H_E}{S_E}$ ‰	$\eta_2 = \frac{S_E}{I_E}$ [Kcal/°K × bit]	$\eta_3 = \frac{Q_E}{I_E}$ [Kcal/bit]
1,1193	12.176,6	41,8440	26,7	$0,0086 \times 10^{-23}$	$2,5026 \times 10^{-23}$
1,2316	13.515,8	46,6522	26,4	$0,0087 \times 10^{-23}$	$2,5317 \times 10^{-22}$
1,2910	13,000,4	44,6749	28,9	$0,0079 \times 10^{-23}$	$2,2989 \times 10^{-23}$
			$\bar{\eta}_1 = 27,33$	$\bar{\eta}^2 = 0,0084 \times 10^{-23}$	$\bar{\eta}_3 = 2,4478 \times 10^{-23}$

Tabla 7-V. — *Aminoácidos*

N°	Substancia	Densidad δ [g/cm³]	Peso molecular P_M	Cantidad de información			Valores termodinámicos		Relaciones		
				I_E [bit/mol]	I_E [bit/g]	$H_E = \frac{1}{\alpha} I_E$ [Kcal/°K mol]	Q_E [Kcal/mol]	$S_E = \frac{Q_E}{291}$ [Kcal/°K × mol]	$\eta_1 = \frac{H_E}{S_E}$ ‰	$\eta_2 = \frac{S_E}{I_E}$ [Kcal/°K × bit]	$\eta_3 = \frac{Q_E}{I_E}$ [Kcal/bit]
1	Aminoetanoico (glicina)...	1,607 [sólido]	75,07	$357,2340 \times 10^{23}$	$4,75 \times 10^{23}$	$81,8066 \times 10^{-3}$	694,7	2,3873	34,3	$0,0067 \times 10^{-23}$	$1,9497 \times 10^{-23}$
2	Aminopropanoico (alanina)	1,404	89,09	$455,1076 \times 10^{23}$	$5,10 \times 10^{23}$	$104,2196 \times 10^{-3}$	927,9	3,1887	32,7	$0,0070 \times 10^{-23}$	$2,0370 \times 10^{-23}$
3	Aminobutanoico.........	1,231	103,12	$547,4825 \times 10^{23}$	$5,30 \times 10^{23}$	$125,3735 \times 10^{-3}$	1161,1	3,9900	31,4	$0,0073 \times 10^{-23}$	$2,1243 \times 10^{-23}$
4	Aminohexanoico.........	1,169	131,17	$740,0950 \times 10^{23}$	$5,64 \times 10^{23}$	$169,4818 \times 10^{-3}$	1627,5	5,5927	30,3	$0,0075 \times 10^{-23}$	$2,1825 \times 10^{-23}$
					$\bar{I}_E = 5,19 \times 10^{23}$				$\bar{\eta}_1 = 32,17$	$\bar{\eta}_2 = 0,0071 \times 10^{-23}$	$\bar{\eta}_3 = 2,0736 \times 10^{-23}$

Tabla 8-V. — *Substancias grasas.*

N°	Substancia	Densidad δ [g/cm³]	Peso molecular P_M	Cantidad de información			Valores termodinámicos		Relaciones		
				I_E [bit/mol]	I_E [bit/g]	$H_E = \frac{1}{\alpha} I_E$ [Kcal/°K × mol]	Q_E [Kcal/mol]	$S_E = \frac{Q_E}{291}$ [Kcal/°K × mol]	$\eta_1 = \frac{H_E}{S_E}$ ‰	$\eta_2 = \frac{S_E}{I_E}$ [Kcal/°K × bit]	$\eta_3 = \frac{Q_E}{I_E}$ [Kcal/bit]
1	Palmitina	0,860 $\left[{}^{80}_{4}\right]$	807,30	$4887,7020 \times 10^{23}$	$6,05 \times 10^{23}$	1,1193	12.176,6	41,8440	26,7	$0,0086 \times 10^{-23}$	$2,5026 \times 10^{-23}$
2	Estearina	0,862 $\left[{}^{80}_{4}\right]$	891,46	$5378,0278 \times 10^{23}$	$6,03 \times 10^{23}$	1,2316	13.515,8	46,6522	26,4	$0,0087 \times 10^{-23}$	$2,5317 \times 10^{-22}$
3	Oleína (no saturada)	0,915 $\left[{}^{20}_{4}\right]$	885,41	$5637,1100 \times 10^{23}$	$6,36 \times 10^{23}$	1,2910	13,000,4	44,6749	28,9	$0,0079 \times 10^{-23}$	$2,2989 \times 10^{-23}$
					$\bar{I}_E = 6,14 \times 10^{23}$				$\bar{\eta}_1 = 27,33$	$\bar{\eta}^2 = 0,0084 \times 10^{-23}$	$\bar{\eta}_3 = 2,4478 \times 10^{-23}$

TABLA 9-V. — *Otros*

Nº	Substancia	Densidad δ [g/cm³]	Peso molecular P_M	Cantidad de infor I_E [bit/mol]	I_E [bit/g]
1	Glucosa	1,544 $\left[{}^{25}_{4}\right]$	180,16	816,3791 $\times 10^{3}$	4,53 $\times 10^{3}$
2	Sacarosa	1,588 $\left[{}^{15}\right]$	342,30	1550,6534	4,53
3	Benceno	0,8794 $\left[{}^{20}\right]$	78,11	417,6938	5,34
4	Naftaleno	1,145	128,16	651,8923	5,08
5	Antraceno	1,25 $\left[{}^{27}_{4}\right]$	178,22	885,0830	4,96
6	Piridina	0,982 (líq.)	79,10	409,8380	5,18
7	Tiofeno	1,0884 $\left[{}^{0}_{4}\right]$ (líq.)	84,13	332,6323	3,95
8	Urea	1,335 (sólido)	60,06	285,9483	4,76
					$\overline{I_E} = 4,79 \times 10^{3}$

TABLA 10-V.
(Véase las Figs.

Nº	Tabla	I_E [bit/g]			η_1 %		
		$\overline{I_E}$	E	S	$\overline{\eta_1}$	E	s
1 *	3-V (13) (14)..	1,01 $\times 10^{23}$	0,22 $\times 10^{23}$	0,80 $\times 10^{23}$	35,8	3,61	13
2	4-V (10)	5,68	0,36	1,09	26,59	1,26	3,79
3	5-V (14)	5,75	0,17	0,62	26,80	0,46	1,67
4	6-V (10)	5,2	0,24	0,71	27,25	0,6	1,81
5	7-V (4)	5,19	0,2	0,34	32,17	1,0	1,73
6	8-V (3)	6,14	0,42	0,59	27,33	0,87	1,22
7	9-V (8)	4,79	0,19	0,51	29,16	0,95	2,52
Σ		32,75 $\times 10^{3}$			205,1		
Promedio.........		$\overline{\overline{I_E}} = 5,46 \times 10^{23}$			$\overline{\overline{\eta_1}} = 29,3$		
s		0,487 $\times 10^{23}$			3,48		
E		0,217 $\times 10^{3}$			1,42		

* Observación: Al promediar no se consideró (1); luego $N = 6$. Las unidades

compuestos orgánicos.

mación	Valores termodinámicos		Relaciones		
$H_E = \frac{1}{\alpha} I_E$ [Kcal/°K mol]	Q_E [Kcal/mol]	$S_E = \frac{Q_E}{291}$ [Kcal/°K mol]	$\eta_1 = \frac{H_E}{S_E}$ ‰	$\eta_2 = \frac{S_E}{I_E}$ [Kcal/°K × bit]	$\eta_3 = \frac{Q_E}{I_E}$ [Kcal/bit]
0,1870	1954,1	6,7151	27,8	$8{,}2 \times 10^{-26}$	$2{,}3862 \times 10^{-3}$
0,3551	3669,8	12,6110	28,2	8,1	2,3571
0,0956	999,6	3,4351	27,8	8,2	2,3862
0,1493	1550,0	5,3265	28,3	8,2	2,3862
0,2027	2176,2	7,4784	27,1	8,4	2,4444
$93{,}8529 \times 10^{-3}$	896,3	3,0800	30,5	7,5	2,1825
$76{,}1728 \times 10^{-3}$	716,8	2,4632	30,9	7,4	2,1534
$65{,}4822 \times 10^{-3}$	584,0	2,0069	32,7	7,0	2,0370
			$\bar{\eta}_1 = 26{,}16$	$\bar{\eta}_2 = 7{,}88 \times 10^{-6}$	$\bar{\eta}_3 = 2{,}2916 \times 10^{-23}$

— *Resumen*

4-V y 5-V)

η_2 [Kcal/°K × bit]			η_3 [Kcal/bit]		
$\bar{\eta}_2$	E	s	$\bar{\eta}_3$	E	s
$7{,}2 \times 10^{-6}$	$0{,}72 \times 10^{-26}$	$2{,}6 \times 10^{-26}$	$2{,}1 \times 10^{-23}$	$0{,}21 \times 10^{-3}$	$0{,}76 \times 10^{-3}$
8,75	1,29	3,86	2,55	0,11	0,33
8,56	0,3	1,08	2,49	0,0025	0,009
8,42	0,035	0,11	2,45	0,011	0,033
7,12	0,21	0,36	2,07	0,047	0,082
8,4	0,28	0,4	2,44	0,1	0,14
7,88	0,19	0,51	2,29	0,08	0,22
$56{,}33 \times 10^{-6}$			$16{,}39 \times 10^{-3}$		
$\bar{\bar{\eta}}_2 = 8{,}1 \times 10^{-6}$			$\bar{\bar{\eta}}_3 = 2{,}34 \times 10^{-23}$		
$0{,}66 \times 10^{-6}$			$0{,}19 \times 10^{-23}$		
$0{,}27 \times 10^{-6}$			$0{,}08 \times 10^{-23}$		

están en el texto.

TABLA 9-V. — *Otros compuestos orgánicos.*

				Cantidad de información			Valores termodinámicos		Relaciones		
Nº	Substancia	Densidad δ [g/cm³]	Peso molecular P_M	I_E [bit/mol]	I_B [bit/g]	$H_E = \frac{1}{\alpha} I_E$ [Kcal/°K mol]	Q_E [Kcal/mol]	$S_E = \frac{Q_E}{291}$ [Kcal/°K mol]	$\eta_1 = \frac{H_E}{S_E}$ ‰	$\eta_2 = \frac{S_E}{I_E}$ [Kcal/°K × bit]	$\eta_3 = \frac{Q_E}{I_B}$ [Kcal/bit]
1	Glucosa	1,544 $\left[{}^{25}_{4}\right]$	180,16	$816{,}3791 \times 10^{23}$	$4{,}53 \times 10^{23}$	0,1870	1954,1	6,7151	27,8	$8{,}2 \times 10^{-26}$	$2{,}3862 \times 10^{-23}$
2	Sacarosa	1,588 $[{}^{15}]$	342,30	1550,6534	4,53	0,3551	3669,8	12,6110	28,2	8,1	2,3571
3	Benceno	0,8794 $[{}^{20}]$	78,11	417,6938	5,34	0,0956	999,6	3,4351	27,8	8,2	2,3862
4	Naftaleno	1,145	128,16	651,8923	5,08	0,1493	1550,0	5,3265	28,3	8,2	2,3862
5	Antraceno	1,25 $\left[{}^{27}_{4}\right]$	178,22	885,0830	4,96	0,2027	2176,2	7,4784	27,1	8,4	2,4444
6	Piridina	0,982 (líq.)	79,10	409,8380	5,18	$93{,}8529 \times 10^{-3}$	896,3	3,0800	30,5	7,5	2,1825
7	Tiofeno	1,0884 $\left[{}^{0}_{4}\right]$ (líq.)	84,13	332,6323	3,95	$76{,}1728 \times 10^{-3}$	716,8	2,4632	30,9	7,4	2,1534
8	Urea	1,335 (sólido)	60,06	285,9483	4,76	$65{,}4822 \times 10^{-3}$	584,0	2,0069	32,7	7,0	2,0370
					$\bar{I}_B = 4{,}79 \times 10^{23}$				$\bar{\eta}_1 = 26{,}16$	$\bar{\eta}_2 = 7{,}88 \times 10^{-26}$	$\bar{\eta}_3 = 2{,}2916 \times 10^{-23}$

TABLA 10-V. — *Resumen*

(Véase las Figs. 4-V y 5-V)

Nº	Tabla	I_B [bit/g]			η_1 %			η_2 [Kcal/°K × bit]			η_3 [Kcal/bit]		
		$\bar{I}_B$	E	s	$\bar{\eta}_1$	E	s	$\bar{\eta}_2$	E	s	$\bar{\eta}_3$	E	s
1 *	3-V (13) (14)..	$1{,}01 \times 10^{23}$	$0{,}22 \times 10^{23}$	$0{,}80 \times 10^{23}$	35,8	3,61	13	$7{,}2 \times 10^{-26}$	$0{,}72 \times 10^{-26}$	$2{,}6 \times 10^{-26}$	$2{,}1 \times 10^{-23}$	$0{,}21 \times 10^{-23}$	$0{,}76 \times 10^{-23}$
2	4-V (10)	5,68	0,36	1,09	26,59	1,26	3,79	8,75	1,29	3,86	2,55	0,11	0,33
3	5-V (14)	5,75	0,17	0,62	26,80	0,46	1,67	8,56	0,3	1,08	2,49	0,0025	0,009
4	6-V (10)	5,2	0,24	0,71	27,25	0,6	1,81	8,42	0,035	0,11	2,45	0,011	0,033
5	7-V (4)	5,19	0,2	0,34	32,17	1,0	1,73	7,12	0,21	0,36	2,07	0,047	0,082
6	8-V (3)	6,14	0,42	0,59	27,33	0,87	1,22	8,4	0,28	0,4	2,44	0,1	0,14
7	9-V (8)	4,79	0,19	0,51	29,16	0,95	2,52	7,88	0,19	0,51	2,29	0,08	0,22
Σ		$32{,}75 \times 10^{23}$			205,1			$56{,}33 \times 10^{-26}$			$16{,}39 \times 10^{-23}$		
Promedio		$\bar{I}_B = 5{,}46 \times 10^{23}$			$\bar{\eta}_1 = 29{,}3$			$\bar{\bar{\eta}}_2 = 8{,}1 \times 10^{-26}$			$\bar{\eta}_3 = 2{,}34 \times 10^{-23}$		
s		$0{,}487 \times 10^{23}$			3,48			$0{,}66 \times 10^{-26}$			$0{,}19 \times 10^{-23}$		
E		$0{,}217 \times 10^{23}$			1,42			$0{,}27 \times 10^{-26}$			$0{,}08 \times 10^{-23}$		

* Observación: Al promediar no se consideró (1); luego $N = 6$. Las unidades están en el texto.

Admitiendo la hipótesis de que existe una relación lineal entre S_E e I_E, hemos aplicado también el método de cuadrados mínimos (regresión lineal) (Dixon, 1951), con el objeto de obtener una mejor estimación de η.

Preparamos una tabla auxiliar (que no incluimos por razones de espacio) en la cual reunimos, en forma sucesiva, los valores de S_E, I_E, $S_E I_E$, I_E^2 de todas las substancias estudiadas, empezando por el hidrógeno y terminando por la urea. De esta tabla deducimos las sumas ΣS_E, ΣI_E, $\Sigma (S_E \times I_E)$ y ΣI_E^2, los promedios de S_E e I_E y (ΣI_E^2).

Obtenemos, así:

$$\left.\begin{aligned} \overline{S}_E &= 5{,}85 \\ \overline{I}_E &= 700 \times 10^{23} \end{aligned}\right\} \tag{24}$$

Puesto que la regresión lineal es:

$$S_E = \overline{S}_E + b\,(I_E - \overline{I}_E) \tag{25}$$

resulta:

$$b = \frac{\Sigma S_E \,.\, I_E - \dfrac{\Sigma S_E \Sigma I_E}{N}}{\Sigma I_E^2 - \dfrac{(\Sigma I_E)^2}{N}} =$$

$$= \frac{865 \times 10^{26} - \dfrac{357 \times 42{,}9 \times 10^{26}}{61}}{104 \times 10^{52} - \dfrac{180 \times 10^{52}}{61}} = 8{,}3 \times 10^{-26} \tag{26}$$

Reemplazando los valores (24) y (26) en (25), sale:

$$S_E = 5{,}85 + 8{,}3 \times 10^{-26}\,(I_E - 0{,}7 \times 10^{26}) \tag{27}$$

Si multiplicamos por $T = 291°$ K, tenemos:

$$\begin{aligned} Q_E = S_E \times 291 = 5{,}85 \times 291 \,+ \\ + \, 8{,}3 \times 291 \times 10^{-26}\,(I_E - 0{,}7 \times 10^{26}) \end{aligned} \tag{28}$$

$$Q_E = 1700 + 2{,}41 \times 10^{-23}\,(I_E - 700 \times 10^{23}) \tag{29}$$

Para calcular la pendiente de esta recta operamos así:

$$Q_E = 1700 + 2{,}41 \times 10^{-23}\, I_E - 2{,}41 \times 700 \tag{30}$$

Por ser:

$$2{,}41 \times 700 = 1686 \cong 1700 \tag{31}$$

resulta:

$$Q_E = 2{,}41 \times 10^{-23}\, I_E \tag{32}$$

$$\frac{Q_E}{I_E} = 2{,}41 \times 10^{-23} = \eta_3 \tag{33}$$

La Tabla 10-V da, para el promedio general de η_3, el valor

$$2{,}34 \times 10^{-23}$$

Además:

$$S_E = \frac{Q_E}{291\ ^{\circ}\mathrm{K}} = \frac{\overline{\overline{\eta}}_3\, I_E}{291} \tag{34}$$

$$\frac{S_E}{I_E} = \frac{\overline{\overline{\eta}}_3}{291} = \frac{2{,}41 \times 10^{-23}}{291} = 8{,}29 \times 10^{-26} \tag{35}$$

$$\overline{\overline{\eta}}_2 = 8{,}29 \times 10^{-26}. \tag{36}$$

La Tabla 10-V da, para $\overline{\overline{\eta}}_2$, el valor $8{,}1 \times 10^{-26}$.

Para obtener η_1 procedemos del siguiente modo:

$$\left.\begin{aligned} I_E \times \frac{1}{\alpha} \times \frac{1}{\overline{\overline{\eta}}_1} &= S_E \\ I_E \times \overline{\overline{\eta}}_2 &= S_E \end{aligned}\right\} \tag{37}$$

$$\therefore \qquad \overline{\overline{\eta}}_2 = \frac{1}{\alpha} \times \frac{1}{\overline{\overline{\eta}}_1} \tag{38}$$

Con el valor de α proveniente de (6) del Capítulo III, 2, y el valor (36) de $\overline{\overline{\eta}}_2$, obtenemos:

$$\overline{\overline{\eta}}_1 = \frac{0{,}229}{8{,}29} = 0{,}0277 = 27{,}7\ ^0/_{00} \tag{39}$$

Según la Tabla 10-V, el valor de $\overline{\eta}_1$ es $29{,}3\ ^0/_{00}$.

La Tabla 11-V resume los resultados que acabamos de enumerar.

La gráfica de la Fig. 6-V es la recta de regresión (30), y representa, también, los valores singulares de Q_E e I_E de las tablas 3-V a 9-V.

Por razones de escala, unas pocas substancias han sido omitidas.

TABLA 11-V. — *Valores numéricos de los* η.

η_1 [°/oo]		η_2 [Kcal/°K × bit]		η_3 [Kcal/bit]	
Promedio general	Regresión lineal $1/(\alpha \times \eta_2)$	Promedio general	Regresión lineal $\eta_3/291$	Promedio general	Regresión lineal
29,3	27,7	$8,1 \times 10^{-26}$	$8,29 \times 10^{-26}$	$2,34 \times 10^{-23}$	$2,41 \times 10^{-23}$

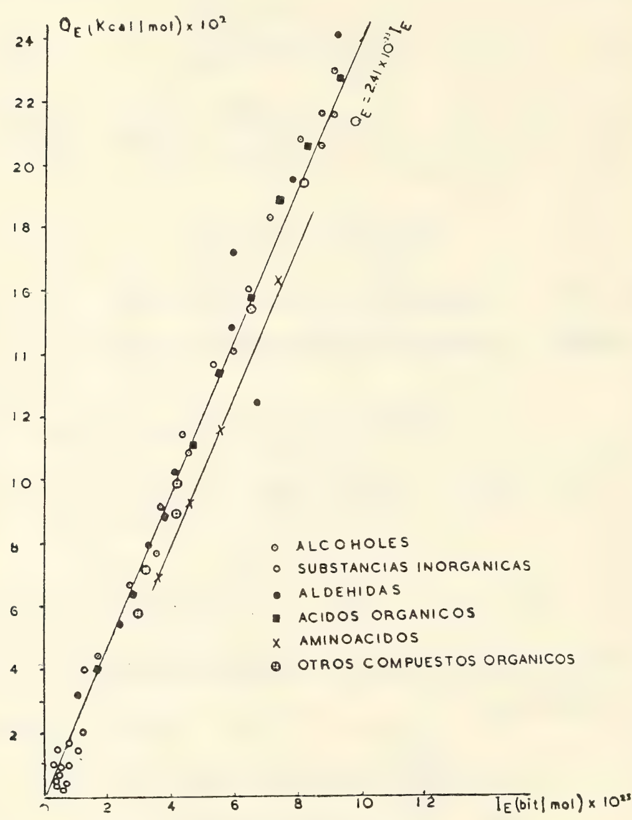


FIG. 6-V. — Valores singulares y regresión lineal de $Q_E = f(I_E)$.

Obsérvese que los valores de los aminoácidos (cruces) determinan una recta paralela a la recta general.

Para los métodos estadísticos usados en esta sección remitimos a Dixon y Massey (1951).

VI. — ANALISIS, POSIBLE INTERPRETACION Y APLICACIONES DE LOS RESULTADOS

En este capítulo abarcaremos en conjunto algunos de los diversos temas y aspectos que han sido estudiados hasta ahora y haremos ciertos cálculos numéricos comparativos.

1. Entropia y energia por unidad de información.

El cociente $\bar{\bar{\eta}}_2$ obtenido en el capítulo precedente (Tabla 10-V) hace corresponder una determinada cantidad de entropía física a un bit, esto es:

$$\bar{\bar{\eta}}_2 = 8,1 \times 10^{-26} \, [(\text{Kcal}/{}^\circ\text{K})/\text{bit}] \qquad (1)$$

¿Se justificaría denominar a esta cantidad *cuanto entrópico*? Dejamos abierta la cuestión.

De la (1) se deduce que *a un bit corresponde una determinada cantidad de energía.* En efecto, multipliquemos su valor $\bar{\bar{\eta}}_2$ por 291° K, que es la temperatura absoluta a que se refieren los calores de formación que hemos utilizado en nuestros cálculos. Tenemos:

$$E = 2,3571 \times 10^{-23} \, [\text{Kcal/bit}] = 9,866 \times 10^{-13} \, [\text{ergio/bit}] \qquad (2)$$

Redondeando el resultado, pondremos:

$$E = 10^{-12} \left[\frac{\text{ergio}}{\text{bit}} \right] \qquad (3)$$

Para precisar el significado de la cantidad de energía por unidad de información, puede ser útil la siguiente analogía: la energía que evoluciona en el proceso de organización de un conjunto de átomos se asemeja a la que hay que poner en juego para estructurar una frase con letras de un alfabeto. Un dactilógrafo invierte en ello una cierta cantidad de trabajo psicofisiológico y mecánico. A cada bit de la frase corresponde una porción alícuota de energía.

El valor de energía E, expresado en kT, resulta:

$$E \cong 25 \frac{kT}{\text{bit}} \qquad (4)$$

2. Posible significado cuántico.

Parece interesante efectuar algunos breves cálculos especulativos desde el punto de vista de la energía E considerada como radiación.

La fotosíntesis clorofiliana es un proceso de capital importancia

en el mundo biológico y está íntimamente vinculado a fenómenos de organización. La luz que interviene en dicha síntesis se halla entre el rojo y el azul (Bonner y Galston, 1959). Tomemos una longitud de onda de esa zona espectral, por ejemplo, el amarillo de $\lambda = 5780 A°$, y cuya frecuencia es, por lo tanto, $0{,}5187 \times 10^{15}$ [seg^{-1}]. Calculemos la energía E_f del correspondiente fotón. será:

$$E_f = h\nu = 3{,}437 \times 10^{-12} \text{ [ergio]} \qquad (5)$$

Hagamos corresponder esta cantidad de energía a un bit. Recordemos el valor de α dado en la (7) del Capítulo III, 2. De él obtenemos, usando $T = 291°$ K, una energía

$$E_o = Tk \log_e 2 = 0{,}0282 \times 10^{-12} \text{ [ergio/bit]} \qquad (6)$$

Disponemos, así, de tres energías en orden decreciente: E_f (luminosa y cuantificada), E (de formación química) y E_o (de organización). La Fig. I-VI las representa conceptualmente y nos facilita varias comparaciones, a saber:

$$\rho_1 = \frac{E_o}{E} \cong 3\,\% \qquad (7)$$

$$\rho_2 = \frac{E}{E_f} \cong 30\,\% \qquad (8)$$

$$\rho_3 = \frac{E_o}{E_f} \cong 1\,\% \qquad (9)$$

La (9) significaría que sólo una pequeña parte de la energía luminosa se incorpora como organización. Este resultado es sugestivo si recordamos que, en la fotosíntesis clorofiliana, únicamente de 0,5 % a 2 % de la energía luminosa queda acumulada en forma de combinaciones químicas (Bonner y Galston, 1959). La (8) indicaría que el 30 % de E_f es realmente aprovechado por la planta, y es de esta porción que una parte, o sea un 3 %, según la (7), está ligada a la organización.

También es útil formarse una idea acerca de las diferencias entre E_o, E, E_f. Resulta:

$$E_f - E = 2{,}437 \times 10^{-12} \text{ [ergio/bit]} \qquad (10)$$

$$E - E_o = 0{,}9718 \times 10^{-12} \text{ [ergio/bit]} \qquad (11)$$

$$E_f - E_o = 3{,}409 \times 10^{-12} \text{ [ergio/bit]} \qquad (12)$$

La diferencia (10) correspondería, quizás, a energía no utilizada de ninguna manera por el sistema; la (11) sería energía vinculada a procesos metabólicos, osmóticos, etc. (un 70 % según la estimación de Morowitz, Capítulo IV, 4, b); la (12) involucraría esta energía y la energía no utilizada.

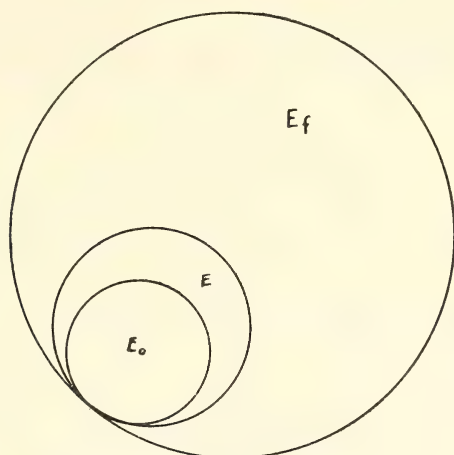


FIG. 1-VI.

De los cocientes (7) a (9) se obtiene:

$$E_f \cong 3\,E \tag{13}$$

Esto conduce a una longitud de onda (λ = 6600 A°) (rojo) de la zona del espectro ya mencionada. ¿Cabría pensar que la fotosíntesis clorofiliana logra organización por fotones específicamente correlativos de la unidad de información? Con esta concepción, el factor $\overline{\overline{\eta}}_2$ nos lleva a prever, teniendo en cuenta algún rendimiento semejante a los ρ, qué luz es necesaria para la fotosíntesis.

Hagamos, finalmente, otra cosa. Ya que la fotosíntesis clorofiliana es un proceso antientrópico o neguentrópico (o diectrópico, según el vocablo utilizado por Fantappié) (1943), y se realiza únicamente dentro de una zona bien determinada del espectro solar, cuyos límites hemos dado antes, se justificaría suponer que entre la cantidad de energía E, correlativa de un bit de información, y la frecuencias electromagnéticas de dicha zona espectral, existe una relación constante, la cual, según la (8), sería:

$$\gamma = \frac{E}{\rho_2\,\nu} \tag{14}$$

Terminemos esta sección dejando constancia de que estos valores numéricos sólo tienen un sentido especulativo. Respecto a otra unidad de información, los resultados serían diferentes. Además, un análisis más completo exigiría, por lo menos, una integración en la zona espectral en que la planta absorbe energía, y el conocimiento de ésta por unidad de tiempo.

Estas estimaciones pueden sugerir trabajos de carácter experimental, que se propondrían, por ejemplo, la investigación de rendimientos.

3. Comparación de resultados numéricos.

Consideramos interesante comparar algunos de los valores consignados en las Secciones 1, 2, 3 y 4 del Capítulo IV con valores obtenidos mediante la constante $\overline{\overline{\eta}}_2$ hallada en el Capítulo V. Atribuimos a estas comparaciones sólo un carácter ilustrativo y orientador.

a) *Resultados de Linschitz.*

Hemos visto (IV, 1) que Linschitz halla, para la formación de un gramo de células, una disminución de entropía de — 10 [cal/°K]. Tomamos, por supuesto, un gramo de células microbianas como un gramo de tejido. Convirtamos este valor en bits [fórmula (8) de III, 2]:

$$I_E \text{ (Linschitz)} = + 43 \times 10^{23} \text{ [bit/g]} \tag{15}$$

Transformemos ahora el valor de entropía encontrado por Linschitz, aplicando $I\eta_2 = — S$ (véase el cuadro del Capítulo III; y el Capítulo V):

$$I_E = 1{,}23 \times 10^{23} \text{ [bit/g]} \tag{16}$$

Recordemos que Linschitz supone, en sus cálculos, condiciones metabólicas ideales, es decir, según la ecuación (14) del Capítulo IV, su modelo de célula funciona de modo perfectamente eficiente. En realidad, el sistema debe trabajar de manera que:

$$— \Delta\dot{F}_{int} < \Delta\dot{F}_{ext} \tag{17}$$

Por lo tanto, los valores reales serán menores que (15) y (16).

b) *Resultados de Dancoff y Quastler.*

Dancoff y Quaster llegan a la conclusión, según vimos en la Sección 2 del Capítulo IV, que un ser humano adulto contiene una cantidad de información:

$$I_{hombre} \leq 2 \times 10^{28} \text{ [bit]} \tag{18}$$

Consideremos un individuo de 70 Kg. Del precedente valor resulta, por gramo de masa:

$$I_E \text{ (Dancoff-Quastler)} \cong 3 \times 10^{23} \text{ [bit/g]} \qquad (19)$$

Este valor proviene de razonamientos puramente informacionales.

Apliquemos ahora la constante $\bar{\bar{\eta}}_2$ para calcular el decremento de entropía que corresponde a la organización de un gramo de materia viva en base al valor (19). Se obtiene:

$$\Delta S_E = -24{,}3 \text{ [cal/(°K} \times \text{g)]} \qquad (20)$$

Hallemos la variación de entropía con el factor α. Se obtiene:

$$\Delta S_o = -0{,}7 \text{ [cal/(°K} \times \text{g)]} \qquad (21)$$

Este valor puede ser considerado como la parte del decremento de entropía física real del sistema biológico que se incorpora exactamente como información en los componentes químicos de un gramo de materia viviente. Por otra parte, el resultado logrado con $\bar{\bar{\eta}}_2$ expresaría el decremento total de entropía (física real) que acompaña a la organización de un gramo de materia viva. El primero es un 3 % del segundo. Diríamos que sólo un 3 % del decremento total de entropía se usa como organización neta.

c) *Resultados de Branson.*

Ahora desarrollaremos algunas consideraciones cuantitativas basándonos en el análisis de Branson (IV, 3). Las estimaciones que incluiremos son, indudablemente, forzadas y de conjunto, pero poseen, creemos, valor de orientación.

Los cálculos de este investigador conducen al valor

$$H_{R\,máx} \cong 3\,k = 10^{-23} \left[\frac{\text{cal}}{\text{°K} \times \text{aminoácido}} \right] \qquad (22)$$

para la neguentropía máxima por residuo aminoácido en el caso de una proteína ideal constituida por veinte aminoácidos ($m = 20$) con igual frecuencia de presentación ($n_1 = n_2 = \ldots = n_m$) y tal que N/m sea un cociente exacto. Cabe decir que el valor (22) expresa la disminución de entropía por aminoácido correspondiente a la organización de una proteína ideal que cumpla las condiciones antedichas.

Entre las veintiséis proteínas estudiadas por Branson (1953), la que tiene menor número N de residuos es la salmina, y la de mayor

N es la toxina de *Chlostridium botulinum*. En la Tabla 1-VI consignamos, a título ilustrativo, algunas de esas proteínas con su correspondiente valor de N y su peso molecular P_M. De estos datos obtenemos los valores medios $\bar{N} \cong 1749$ y $\bar{P}_M = 312.857$. Razonemos con una proteína media que se caracterice por estos valores medios. A cada molécula de dicha proteína media le corresponderá un aumento de neguentropía:

$$\bar{H}_{molécula} = 1749 \times 10^{-23} \left[\frac{\text{cal/°K}}{\text{molécula}} \right] \qquad (23)$$

TABLA 1-VI. — *Algunas proteínas consideradas por Branson* (1953).

Proteína	N	P_M
1. Salmina	58	8.000
2. Insulina	103	12.000
3. Zeína	336	40.000
4. Miosina	780	100.000
5. Tiroglobulina	1935	630.000
6. Fibrinógeno	3381	400.000
7. Toxina de *Chl. bot.*	7452	900.000

Para un mol, el valor del incremento será la (23) multiplicado por el número de Avogadro:

$$H_{mol} \cong 11 \times 10^{3} \text{ [cal/(°K} \times \text{mol]} \qquad (24)$$

Para un gramo, dividimos la (24) por $\bar{P}_M$ tomado en gramos:

$$\bar{H}_{gramo} = 3{,}5 \times 10^{-2} \text{ [cal/°(K} \times \text{g)]} \cong 0{,}04 \text{ [cal/(°K} \times \text{g)} \qquad (25)$$

De este valor, con la transformación (8) de III, 2, obtenemos:

$$I_E = 0{,}15 \times 10^{23} \text{ [bit/g]} \qquad (26)$$

d) *Resultados de Moroiwtz.*

Del estudio de Morowitz (IV, 4) resulta:

$$I_E \text{ (Morowitz)} = 4{,}6 \times 10^{23} \text{ [bit/g]} \qquad (27)$$

Veamos qué decremento entrópico real le corresponde a esta cantidad de información aplicando $\overline{\eta}_2$. Resulta:

$$\Delta S_E = -37 \text{ [cal/(°K} \times \text{g)]} \qquad (28)$$

Para *Bacillus coli* se tiene (IV, 4), a 37,5° C, una producción de calor:

$$\Delta Q = 4 \times 10^3 \text{ [cal/g]} \qquad (29)$$

Por lo tanto:

$$\Delta S_E = -13 \text{ [cal/(°K} \times \text{g)]} \qquad (30)$$

Los valores (28) y (30) deberían ser prácticamente iguales, de acuerdo con los razonamientos desarrollados en este trabajo. Se podría explicar su disparidad considerando las aproximaciones de cálculo y los posibles errores en las mediciones calorimétricas.

TABLA 2-VI— *Resultados Numéricos.*
(Véase el cuadro del Capítulo III)

Método	I [bit/g]	H [cal/°K×g]	S_0 [cal/°K×g]	S [cal/°K×g]	J [bit/g]
Linschitz (*B. picnoticus*).	$1{,}23 \times 10^{23}$			-10	-43×10^{23}
Dancoff-Quastler (materia viva en general).	3×10^{23}		$-0{,}7$	$-24{,}3$	-104×10^{23}
Branson (Proteínas).	$0{,}15 \times 10^{23}$	$0{,}04$	$-0{,}04$	$-1{,}37$	
Morowitz (Microorganismo promedio).	$4{,}6 \times 10^{23}$			-37	
Morowitz (dato experimental para *B. coli*).	$1{,}6 \times 10^{23}$			-13	-56×10^{23}
Mixto (Substancias químicas).	$5{,}46 \times 10^{23}$			$-45{,}2$	

e) *Comparación de los resultados de a, b, c y d.*

En la Tabla 2-VI reunimos algunos resultados numéricos obtenidos por diferentes autores o elaborados mediante los métodos propuestos por ellos. Podemos adoptar, provisoriamente, como probable valor de la cantidad de información incorporada en la estructura biológica el valor prometido $\bar{I}_E = 2{,}67 \times 10^{23}$ [bit/g].

f) *Información acumulada durante el crecimiento biológico.*

El crecimiento biológico se basa esencialmente en procesos de síntesis química. Frente a esto, la primera simple idea que se nos ocurre es la de calcular la cantidad de información acumulada por los seres vivos durante tiempos determinados de su desenvolvimiento.

Si I_E expresa, como hemos visto, el número de bits por gramo de tejido, podemos describir:

$$I_E = \frac{dI}{dm} \qquad (31)$$

o también:

$$dI = I_E \, dm \qquad (32)$$

Se puede conocer el incremento diferencial de la masa de tejido en base a los estudios matemáticos que se ha llevado a cabo sobre las curvas de crecimiento (Lotka, Volterra, etc.).

α) *Diferencial del crecimiento biológico.*

Pensemos como población un conjunto de células agrupadas en forma de tejido o en forma de colonia de microorganismos. Para nuestro objeto podríamos usar la clásica *ecuación logística* (Lotka, 1925; Volterra, 1931; Kostitzin, 1937; Morales y Shock, 1942). Para un conocimiento más reciente de este asunto, remitimos a Landahl (1957), Bartholomay (1958) y Barakat (1959).

De la ecuación logística se obtiene una función $p(t)$ que describe el crecimiento de una población. El diferencial de esta función es $dp(t) = p'(t)\,dt$. Si μ es la masa media de una célula, multiplicándola por el número de células que, en este caso, está dado por $dp(t)$, logramos el incremento de masa:

$$dm = \mu p'(t)\,dt \qquad (33)$$

β) *Calor de crecimiento biológico.*

Con la igualdad (33), la (32) se convierte en

$$dI = I_E \, \mu p'(t)\,dt \qquad (34)$$

Si multiplicamos por el factor $\bar{\bar{\eta}}_2$ y la temperatura absoluta T a la cual se desarrolla el crecimiento, obtenemos el diferencial de calor correspondiente al intervalo dt:

$$-dQ\,[\text{cal}] = I_E \left[\frac{\text{bit}}{\text{g}}\right] \bar{\bar{\eta}}_2 \left[\frac{\text{cal/°K}}{\text{bit}}\right] \mu p'(t) \left[\frac{\text{g}}{h}\right] T\,[\text{°K}]\, dt\,[h] \qquad (35)$$

del cual se obtiene obviamente dQ / dt.

Esta fórmula permite prever la cantidad de calor liberada por hora por una colonia de células en crecimiento. La verificación experimental es realizable mediante los métodos microcalorimétricos desarrollados por Calvet y sus colaboradores. Los métodos respiratorios podrían ser útiles, pero mucho menos exactos y demasiado indirectos. Por otra parte, las determinaciones microcalorimétricas podrían ser utilizadas para calcular I_E y compararlo con valores obtenidos por otros caminos. Luego nos ocuparemos de estas cuestiones.

De la expresión (35) se deduce la cantidad de calor eliminada durante un determinado período de crecimiento. En efecto:

$$-Q = I_E \bar{\bar{\eta}}_2 \mu T \int_{1}^{t_2} p'(t)\, dt \qquad (36)$$

El significado biofísico de dQ/dt y de la expresión (36) es el siguiente: *al formarse materia viva por el crecimiento del sistema de células (colonias microbianas, tejidos) se incorpora una cantidad constante de bits de información por gramo y por hora, y este proceso de organización se acompaña de una eliminación de calor que corresponde a un descenso de la entropía física real del sistema biológico.* En un dado período de crecimiento, el sistema libera una cantidad definida de calor. Estos resultados conceptuales están en un todo de acuerdo con los análisis desarrollados por Schrödinger (1946) y Palacios (1947), que se resumen en el siguiente enunciado: *los seres vivos se alimentan de entropía negativa.*

γ) *Utilización de datos microcalorimétricos.*

Existen estudios de crecimiento e investigaciones microcalorimétricas biológicas que nos permiten someter las relaciones matemáticas dQ/dt y (36) a un cotejo numérico. Vamos a utilizar valores de desarrollo microbiano de Topley y colaboradores (1953) y de Calvet y Prat (1956). Se entiende que una prueba numérica precisa de dichas

relaciones impone estudios experimentales específicos, que hay que realizar.

Huelga decir que en el análisis de los efectos calorimétricos de un sistema biológico es imprescindible discriminar cuáles corresponden al crecimiento propiamente dicho. Por ejemplo, en la germinación de semillas se producen efectos calóricos causados por la hidratación; cuando el vegetal está en desarrollo, una parte del calor eliminado se debe al metabolismo de base; no se trata, pues, de desarrollo de calor por biosíntesis. Esto ocurre predominantemente en los meristemas y en los extremos de los tallos, donde la actividad mitótica es mayor. Cuando se estudia colonias microbianas desde este punto de vista es menester tener en cuenta la irregularidad del comportamiento térmico derivado de la interrelación celular más floja que la que se observa en células organizadas como tejidos. La termogénesis se centuplica en los bacterios al pasar del estado de reposo germinativo al estado de mitosis.

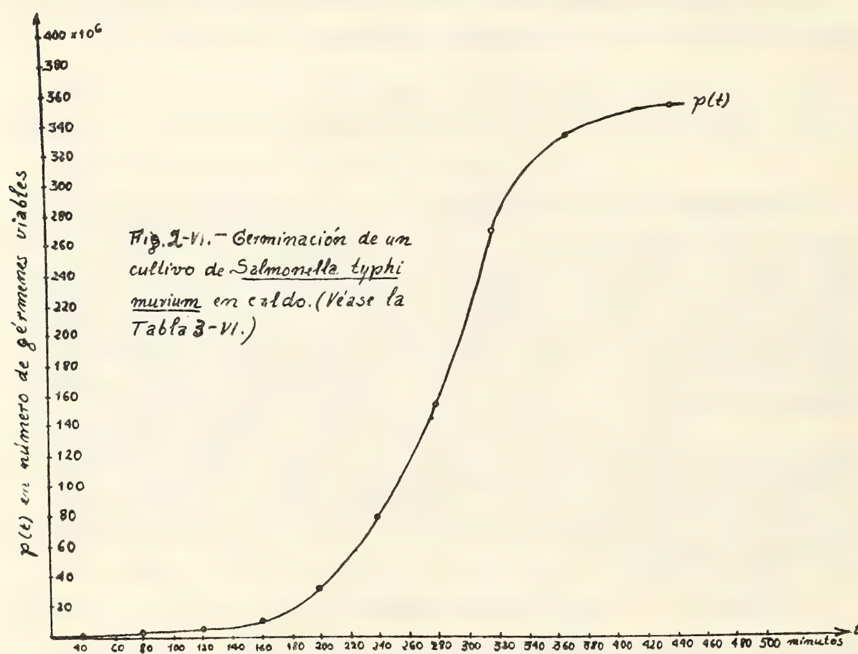


Fig. 2-VI.

Necesitamos conocer la masa de materia viviente y, para ello, debemos proceder al estudio de la función $p\ (t)$ en una dada población de células.

Sea el ejemplo de la Tabla 3-VI, Fig. 2-VI. En esta tabla, a los datos de crecimiento tomados de Topley y col. (1953), hemos agregado los incrementos de masa Δm multiplicando $\Delta p\,(t)$ por $\mu = 10^{-13}$ g, que tomamos como valor aproximado de la masa de un microorganismo (Calvet y Prat, 1956; Morowitz, 1955).

TABLA 3-VI. — *Germinación de* Salmonella typhi murium *en caldo* (Topley y col., 1953) (Véase Fig. 1-VI)

Tiempo en minutos	Nº de gérmenes viables por cm³ $p\,(t)$	Incrementos $\Delta p\,(t)$ de población	Incrementos Δm de masa viva en 10^{-7} g
0	—	—	—
40	828.800	—	—
80	1.539.000	710.200	0,71
120	4.363.000	2.284.000	2,82
160	12.150.000	7.787.000	7,79
200	32490.000	20.340.000	20,34
240	81.640.000	49.150.000	49,15
280	155.900.000	74.260.000	74,26
320	271.700.000	115.800.000	115,80
370	334.300.000	62.600.000	62,60
440	351.400.000	17.100.000	17,10

La representación gráfica de dQ/dt se llama *termograma* (Calvet y Prat, 1956). De la (35) se deduce la ecuación del termograma basada en la Teoría de la Información. En la Fig. 3-VI consignamos un termograma de *Salmonella typhi* correspondiente a un cultivo de 10 cm³ a 37 °C (Calvet y Prat, 1956). Del trazado se deduce aproximadamente $dQ/dt = 0{,}09$ [cal/h] a las siete horas. Por centímetro cúbico es:

$$\frac{dQ}{dv\,dt} = -\,0{,}009 \left[\frac{\text{cal}}{\text{cm}^3 \times h}\right] \qquad (37)$$

Introduzcamos ahora valores numéricos en la fórmula (35). Adoptamos como valor de $\overline{\overline{\eta}}_2$ el promedio de la Tabla 11-V y, para I_E, el promedio $2{,}67 \times 10^{23}$ [bit/g] obtenido de la Tabla 2-VI, al cual asignamos sólo un carácter de orientación. De la Tabla 3-VI, obtenemos, a las siete horas, el valor apıoximado.

$$\mu p'(t) = 17 \times 10^{-7} \left[\frac{g}{h} \right] \tag{38}$$

Luego:

$$\frac{dQ}{dm\, dt} = -0{,}011 \left[\frac{\text{cal}}{g \times h} \right] \tag{39}$$

Los valores (37) y (39) no son muy dispares. Indudablemente, este hecho carece de fuerza probatoria, ya que la Tabla 3-VI y la Fig. 3-VI se refieren a experimentos bastante diferentes, pero es sugestivo. Además, el valor (7) se refiere a unidad de volumen, y el (39) a unidad de masa.

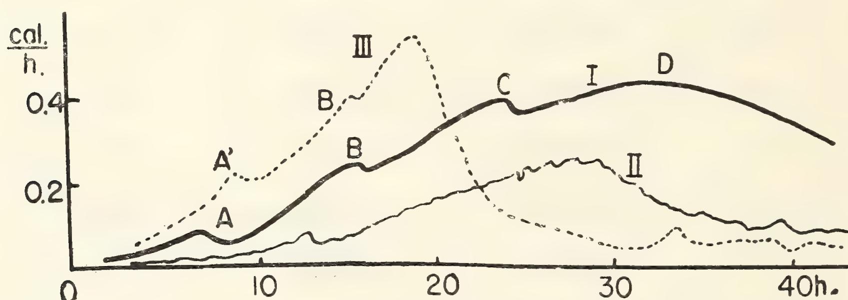


Fig. 3-VI. — Termograma de *Salmonella typhi* (I) (10 cm³ a 37° C). Los otros termogranas corresponden a *S. paratyphi* (paratifico A) (II) y *S. schottmulleri* (paratífico B) (III) (Calvet y Prat, 1956)

Más atractivo es el resultado que se logra con el cálculo de la cantida de calor eliminado por germen y por hora. Dividamos la expresión (39) por el número de microorganismos generados a las siete horas (Tabla 3-VI). Resulta:

$$\frac{1}{\Delta\, p(t)} \cdot \frac{dQ}{dt} = -65 \times 10^{-11} \left[\frac{\text{cal}}{h \times \text{germen}} \right] \tag{40}$$

Se ha comprobado (Calvet y Prat, 1956) que *Escherichia coli* desprende 60×10^{-11} [cal/($h \times$ germen)] al comienzo del desarrollo, 198×10^{-11} [cal/($h \times$ germen)] a las dos horas, 130×10^{-11} [cal/($h \times$

$\times$ germen)] a las tres horas y 75×10^{-11} [cal/(h $\times$ germen)] a las siete horas.

Insistimos en que la concordancia que se observa en los órdenes de magnitud, si no son casuales, poseen sólo un significado alentador.

Para ilustrar numéricamente la fórmula (36) elegiremos el período desde $t_1 = 0$ hasta $t_2 = 440$ minutos de la Tabla 3-VI. El desarrollo total que ha alcanzado la población al término de dicho período corresponde a la integral de la función $p'(t)$, esto es:

$$p(t_2) - p(t_1) = \int_{0}^{440\ min} p'(t)\, dt = 351.400.000 \text{ [gérmenes]} \qquad (41)$$

Puesto este número en la (36), sale:

$$Q = -0{,}24 \text{ [cal]} \qquad (42)$$

Este valor es superior al que se puede deducir de algunos termogramas de Calvet y Prat (1956). Correspondería al área abarcada por el termograma del cultivo de la Tabla 3-VI, es decir, a la totalidad del calor liberado por la colonia de *Salmonella,* cuya temperatura ha sido supuesta como de 37° C.

Recordemos que se acostumbra a distinguir cuatro etapas en la curva de crecimiento microbiano: fase de crecimiento lento, fase de crecimiento rápido (fase logarítmica), fase estacionaria y fase de declinación (Topley y col., 1953). En todo el proceso de desarrollo hay que considerar el total de gérmenes y el número de gérmenes viables. Tomemos la fase de crecimiento rápido de la Tabla 3-VI (Fig. 2-VI), o sea, el intervalo entre $t_1 = 120$ min y $t_2 = 320$ min. En este período de casi cuatro horas, el incremento en el número de gérmenes viables es, aproximadamente, de 267×10^6. La (35) da $Q - = 0{,}18$ [cal]. Está de más decir que, sin experimentos especiales, no se puede pretender una mejor concordancia entre esta clase de resultados y los resultados termográficos.

A pesar de las condiciones insatisfactorias en que han sido efectuadas las precedentes estimaciones cuantitativas, éstas sugieren líneas de trabajo experimental microcalorimétrico con útiles aplicaciones biológicas de la Teoría de la Información.

REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

AUGENSTINE, L.; BRANSON, H. R., y CARVER, E. B. 1953. — "A search for intersymbol influences in protein structure", en el libro de H. Quastler: *Essays on the use of Information Theory in Biology.* University of Illinois Press. Urbana.

BAER, ROBERT, M. 1953.— "Some general remarks on Information Theory and entropy", en el libro de H. Quastler: *Essays on the use Information Theory in Biology.* University of Illinois Press. Urbana.

BARAKAT, R. 1959. — "A note on the transient stage of the random dispersal of logistic populations". *Bulletin of Mathematical Biophysics, 21,* p. 141-151.

BARTHOLOMAY, A. F. 1958. — "On the linear birth and death processes of Biology as Markoff chains". *Bulletin of Mathematical Biophysics, 29,* p. 97-118.

BELL, D. A. 1953. — "Information Theory and its Engineering Applications" Pitman. London.

BONNER, J., y GALSTON, A. W. 1959. — "Principios de Fisiología Vegetal". Aguilar. Madrid.

BRANSON, H. R. 1953. — "Information Theory and the structure of proteins", en el libro de H. Quastler: *Essays on the use of Information Theory in Biology.* University of Illinois Press. Urbana.

BRILLOUIN, L. 1956. — "Science and Information Theory". Academic Press. New York.

CALVET, E., y PRAT, H. 1956. — "Microcalorimétrie. Applications Physicochimiques et Biologiques." Masson et Cie. París.

CARPENTER, PH. L. 1956. — "Immunology and Serology". W. B. Saunders Company. Filadelfia-Londres.

DANCOFF, S. M., y QUASTLER, H. 1953. — "The information content and error rate of living things", en el libro de H. Quastler: *Essays on the use of Information Theory in Biology.* University of Illinois Press. Urbana.

DIXON, W. J., y MASSEY, F. J. 1951. — "Introduction to statistical analysis". McGraw-Hill. New York.

DUCROCQ, A. 1955. — "Descubrimiento de la Cibernética". Compañía General Fabril Editora. Buenos Aires.

FANTAPPIÉ, L. 1943. — "Teoría unitaria de la causalidad y la finalidad en los fenómenos físicos y biológicos fundada en la Mecánica Ondulatoria y Relativista". *Revista Matemática Hispano-Americana,* cuarta Serie, 2, III, p. 82.

FEINSTEIN, A. 1958. — "Foundations of Information Theory". Mc Graw-Hill Book Company, Inc. New York.

FELLER, W. 1958. — "An Introduction to Probability Theory and its Applications". John Wiley and Sons, Inc. New York.

GLASSTONE, S. 1947. — "Thermodynamics for chemists". V. Dan Nostrand Company, Inc. New York.

HODGMAN, CH. D. 1945. — "Handbook of Chemistry and Physics" Chemical Rubber Publishing Company". Cleveland, Ohio.

KARREMAN, G. 1955. — "Topological information content and chemical reactions". *Bulletin of Mathematical Biophysics, 17,* p. 279-285.

KHINCHIN, A. I. 1957. — "Mathematical foundations of Information Theory". Dover Publications, Inc. New York.

KOSTITZIN, V. A. 1937. — "Biologie Mathématique". Armand Colin, París.

KÜPFMÜLLER, K. 1955.— "Informationstheorie. Jahrbuch des elektrischen Fernmeldewesens". F. Gladenbeck-G. Heidecker. Windshein. Mittefranken.

LANDAHL, H. D. 1957. — "Population growth under the influence of random dispersal". *Bulletin of Mathematical Biophysics, 19,* p. 171-186.

LICHTENTHAL, S. 1960. — "¿Qué es la Teoría de la Informacin?". *Revista Mirador,* Nº 6, p. 78-82; 104-106.

LINSCHITZ, H. 1953, a. — "Information and physical entropy, "en el libro de H Quastler: *Essays on the use of Information Theory in Biology.* University of Illinois Press. Urbana.

LINSCHITZ, H. 1953, b. — "The information content of a bacterial cell", en el libro de H. Quastler: *Essays on the use of Information Theory in Biology.* University of Illinois Press. Urbana.

LOTKA, A. J. 1925. — "Elements of Physical Biology". Williams. Baltimore.

MC ELVAIN, S. M. 1953. — "La caracterización de compuestos orgánicos. (Análisis Orgánico Funcional)". Aguilar. Madrid.

MORALES, M. F., y SHOCK, N. W. 1942. — "A fundamental form for the differential equation of colonial and organism growth". *Bulletin of Mathematical Biophysics, 4,* p. 63-71.

MOROWITZ, H. J. 1955. — "Some order-disorder considerations in living systems". *Bulletin of Mathematical Biophysics, 17,* p. 81-86.

PALACIOS, J. 1947. — "De la Física a la Biología". Publicaciones de la Revista *Insula.* Madrid.

PAULING, L. 1945. — "The nature of the chemical bond and the structure of molecules and crystals". Cornell University Press. New York.

RAMAKRISHNA, B. S., y SUBRAMANIAN, R. 1958. — "Relative efficiency of English and German languages for communication of semantic content". *IRE Transactions on Information Theory,* IT-4, Nº 3, p. 127.

RASHEVSKY, N. 1955. — "Life, Information Theory, and Topology". *Bulletin of Mathematical Biophysics, 27,* p. 229-235.

ROTHSTEIN, J. 1951. — "Information, measurement and Quantum Mechanics". *Science, 114,* p. 171.

ROTHSTEIN, J. 1952. — "Information and Thermodynamics". *The Physical Review, 85,* second series, January-March, p. 135.

SCHRÖDINGER, E. 1946. — "What is life? The physical aspect of the living cell". Cambridge University Press. Mc. Millan Company. New York. "¿Qué es la vida?" Espasa-Calpe. Buenos Aires.

SHANNON, C. E. 1948. — "A Mathematical Theory of Communication". *The Bell System Technical Journal, 27,* p. 379-423; 623-656.

SZILARD, L. 1929. — "Sobre la reducción de entropía en un sistema termodinámico por intervención de un ser inteligente". *Zeitschrift für Physik, 53,* p. 840.

TOPLEY, W. W. C.; WILSON, G. S., y MILES, A. A. 1953. — "Bacteriología e Inmunología". Salvat. Barcelona-Buenos Aires.

VALENTINUZZI, M. E. 1960. — "Conceptos básicos de la Teoría de la Información". *Revista Telegráfica Electrónica,* Nº 575, p. 540-545.

VALETNINUZZI, M., y VALENTINUZZI, M. E. 1963 — "Information content of chemical structures and some possible biological applications". *Bulletin of Mathematical Biophysics, 25* p. 11-27.

VOLTERRA, V. 1931. — "Lecons sur la théorie mathématique de la lutte pour la vie". Gauthier-Villars. París.

ZEMANEK, H. 1959. — "Elementare Informationstheorie". R. Oldenbourg. Wien.

CAPACIDAD DE PROTECCION Y COINCIDENCIAS ANTIGENICAS DE SUEROS ANTIOFIDICOS

POR

LUIS MARIO SCAVINI Y RODOLFO W. FERRARESI (*) (**)
Instituto Nacional de Microbiología. División Sueros.

1. — Introducción

Muchos autores admitían que un suero antiofídico monovalente sólo tiene capacidad antitóxica contra el veneno usado en su preparación. (C. Phisalix y E. Bertrand, 1893-1894; Vital Brazil, 1898-1901; M. Arthus, 1911).

Calmette (1907) demostró que hay una coincidencia antigénica entre venenos ofídicos de la misma naturaleza, aunque el veneno fuera elaborado por especies alejadas. M. Arthus sostiene que los venenos de *Bothrops lanceolatus* y *Crotalus terrificus*, que tienen propiedades coagulantes de la sangre y acción depresiva del sistema nervioso, generan anticuerpos específicos para cada veneno, no confiriendo protección cruzada.

Sin embargo, algunos hechos niegan en parte la posición rígida de Arthus, confirmando la hipótesis de Calmette.

Así, ya en el año 1897, J. Martín observó que el veneno anticobraico neutraliza completamente los efectos del veneno de *Naja tripudians* (curarizante y anticoagulante) y ejerce una débil acción antitóxica sobre el veneno de *Pseudechis*, que es curarizante y coagulante.

Houssay y Negrete, en 1921, observan que un suero terapéutico bivalente anti-*Bothrops alternata* y anti-*Crotalus terrificus* es capaz de neutralizar 100 dosis mortales de paloma de veneno de *Bothrops alternata*, 60 dosis mortales de veneno de *Bothrops lanceolatus*, 53 dosis mortales de veneno de *Bothrops neuwiedii*, 25 dosis mortales

(*) Agradecemos al Dr. Samson Rascovsky la colaboración prestada en las determinaciones biológicas.

(**) Los autores expresan su reconocimiento al señor Director del Instituto, Dr. Ignacio Pirosky, por las sugestiones y el estímulo dados para este trabajo.

de veneno de *B. ammodytoides*, 75 dosis mortales de veneno de *Crotalus terrificus*, 4 dosis mortales de *Vípera aspis* y una sola dosis mortal de veneno de *B. flavoviridis* y de *Echis carinatus*.

Ahuja (1935) demuestra que la neurotoxina de veneno de *Naja flava* de Africa es neutralizada por el suero anti-*Naja-naja* de la India.

Entre otros, estos trabajos confirman la idea de que venenos elaborados por especies vecinas pueden contener algún elemento antigénico común, pudiendo ser neutralizados en forma cruzada. En general, en este caso se necesitan grandes dosis de suero heterólogo.

Otras experiencias demuestran, en casos de sueros antivenenosos, que éstos tienen mayor capacidad de protección en forma cruzada que sueros preparados con el veneno homólogo. Así C. H. Kellaway (1937) encontró que el suero preparado contra veneno de *Acanthophis antarcticus* (curarizante y anticoagulante) es capaz de neutralizar 4 dosis letales cobayo para veneno homólogo e inhibe los efectos de 12 dosis letales para el veneno de *Notechis scutatus* y tiene una inmunidad apreciable frente al veneno de *Acanthophis*.

La misma acción paradojal se encontró, por ejemplo, con el suero antiviperino, que neutraliza parcialmente el veneno de abeja (*Apis mellifica*).

En resumen, se ha encontrado en especies aun alejadas antígenos semejantes y a la vez venenos de serpientes de especies vecinas con propiedades fisiológicas análogas, teniendo, sin embargo, distintas cualidades antigénicas.

La difusión en gel permite un estudio de los sistemas inmunológicos mucho más analítico; por ello nos decidimos a aplicar este método en el estudio de las coincidencias antigénicas entre los venenos de serpientes venenosas habituales en la República Argentina, cotejando simultáneamente dichos análisis con las pruebas de protección antitóxica *in vivo*.

2. — Materiales

a) *Venenos*: Se estudiarán los venenos de *Bothrops alternata, Bothrops neuwiedii, Bothrops jararaca, Bothrops jararacussú* y *Crotalus terrificus*.

Estos fueron obtenidos de serpientes recogidas en distintas partes del país y en diferentes épocas del año.

Se desecan al vacío con cloruro de calcio y se conservan en las mismas condiciones a 4° C.

Para su utilización son disueltos en solución de cloruro de sodio al 0,9 %.

b) *Sueros*:

Suero antiofídico bivalente (*B. alternata* y *B. neuwiedii*), obtenido por inmunización equina con mezclas en partes iguales de veneno *B. alternata* y *B. neuwiedii* adsorbido en hidróxido de aluminio, fraccionados por precipitación con sulfato de sodio anhidro al 22 % y conteniendo como conservador fenol al 0,5 %.

Suero anti-B. Jararacussú, obtenido por inmunización de un equino con dosis crecientes de veneno de *B. jararacussú*.

El plasma obtenido fue purificado y concentrado por el método de digestión péptica y precipitación salina de Pope (1939).

Sueros antialternata, antineuwiedii, antijararaca, anticrotálico, obtenidos por inmunización equina con dosis crecientes de veneno adsorbido en hidróxido de aluminio. Se les agregó tricresol al 0,3 % y se les eliminó el fibrinógeno por precipitación con cloruro de calcio al 10 %.

3. Técnicas

a) *Físicoquímica*: Oudin (1948) comenzó a usar el método de difusión en gel para el análisis de los sistemas antigénicos en tubo de ensayo de 5 mm de diámetro.

Outcherlony (1949) aplicó el método de doble difusión en cápsulas de Petri. Hemos recurrido a dicho método para poner en evidencia los sistemas antigénicos en sueros antiofídicos obtenidos con venenos de serpientes de la misma y de diferentes especies.

Así hemos dispuesto de un medio capaz de analizar los antisueros aun cuando los sistemas antígeno-anticuerpo reaccionen simultáneamente.

Hemos procedido de la siguiente manera: se hace una solución de agar puro Difco u otro similar al 5 % en agua destilada poniéndose a baño de maría hasta su disolución; la solución se clarifica por precipitación con cloruro de calcio al 10 %; se filtra a través de lana de vidrio, virtiéndose luego en un recipiente plano, cortándose en pequeños cubos siendo lavados 3 días con agua común y 3 días con agua destilada; se agrega solución reguladora de fosfato monopotásico 0,2 M e hidróxido de sodio 0,2 N hasta tener una solución de agar al 2 % y cuyo pH final es de 7,2. A esta preparación se le agrega merthiolate a una concentración de 0,01 gr %.

La comprobación de la concentración de agar se puede efectuar por determinación de peso seco en una estufa a 100-110° C hasta peso constante.

Las cápsulas de Petri, que tienen 10 cm de diámetro por 1,5 cm de alto, se cubren con una capa base de agar de aproximadamente 1 mm de espesor, sobre la cual se colocan matrices de vidrio de 0,8 mm de diámetro, siendo la distancia entre los centros de cada matriz de 2 cm. Se agrega una segunda capa de agar fundido, quedando la altura final de 2 a 3 mm; se trabaja en una superficie con nivel controlado.

Una vez enfriado el agar se sacan las matrices de vidrio y quedan hechas las concavidades para la siembra de los sistemas inmunes a ser analizados.

Los sueros se colocan en la concavidad central y diluciones de los antígenos en las concavidades periféricas, siendo los volúmenes de ambas sustancias de 0,1 ml. La incubación se hace a temperatura ambiente.

A los cinco días ya aparecen las primeras líneas de precipitación, las cuales pueden ser observadas óptimamente al décimo día. El número de líneas depende del número de antígenos que son capaces de reaccionar con los anticuerpos correspondientes.

Los sistemas antígeno-anticuerpo deben ser solubles y la interpretación de las líneas estará regida por tres factores: posición, curvatura y densidad. La posición dependerá de la concentración del antígeno, la curvatura del coeficiente de difusión y la densidad de la concentración en anticuerpos.

b) *Biológica*: Las mediciones de la capacidad protectora de los sueros frente a los venenos se efectuó en la forma siguiente:

Los venenos desecados se diluyen en solución fisiológica y estas diluciones son inyectadas en la vena caudal en lauchas de 18-20 gr de peso; las lauchas se observan durante tres días.

De esta manera se determina la dosis letal mínima de los venenos. Luego se efectúan mezclas del suero a medir frente a múltiplos de la dosis letal mínima de veneno, se deja a temperatura ambiente durante una hora y la mezcla se inyecta en la vena caudal a lauchas de 18-20 gr.

Se inoculan 3 lauchas por dosis.

En estas experiencias se han utilizado 1.200 lauchas.

En las tablas y fotografías adjuntas están consignados los resultados de las experiencias.

TABLA 1

Determinacón de la capacidad protectora de sueros antiofídicos frente a venenos homólogos y heterólogos.

Medición in vivo

Suero	Medida frente a veneno	D L M	Capacidad protectora: mg veneno/ ml suero
Suero bivalente serie 192	*B. alternata*	175	4,375
	B. neuwiedii	200	3,0
	B. jararacussu	45	1,125
	B. jararaca	150	2,200
	C. terrificus	0	—
Suero anti *alternata*	*B. alternata*	50	1,250
	B. neuwiedii	50	0,750
	B. jararacussu	20	0,100
	B. jararaca	40	0,600
	C. terrificus	0	—
Suero anti *neuwiedii*	*B. neuwiedii*	120	1,800
	B. jararacussu	20	0,100
	B. alternata	50	1,250
	B. jararaca	25	0,375
	C. terrificus	0	—
Suero anti *jararaca*	*B. alternata*	15	0,375
	B. neuwiedii	20	0,300
	B. jararacussu	0	—
	B. jararaca	40	0,600
	C. terrificus	0	—
Suero anti *jararacussu*	*B. alternata*	25	0,625
	B. neuwiedii	30	0,450
	B. jararacussu	800	4,000
	B. jararaca	175	2,500
	C. terrificus	4	0,020
Suero anti crotálico	*B. alternata*	10	0,250
	B. neuwiedii	20	0,300
	B. jararacussu	15	0,075
	B. jararaca	10	0,150
	C. terrificus	75	0,375

TABLA 2

Determinación de la capacidad protectora de sueros antiofídicos frente a venenos homólogos y heterólogos.

Método de difusión.

(La capacidad protectora se estima tomando como guía la nitidez de las líneas de precipitación.)

Suero	Medidas frente a veneno	Nº líneas de precipitación	Capacidad protectora: mg. veneno/ ml. suero
Suero bivalente serie 192	*B. alternata*	6	3,500
	B. neuwiedii	5	4,000
	B. jararacussu	2	0,800
	C. terrificus	—	—
	B. jararaca	3	3,000
Suero anti *alternata* ...	*B. alternata*	3	1,000
	B. neuwiedii	5	0,800
	B. jararacussu	3	0,700
	B. jararaca	3	0,800
	C. terrificus	—	—
Suero anti *neuwiedii* ...	*B. alternata*	6	2,000
	B. neuwiedii	4	2,000
	B. jararacussu	—	—
	B. jararaca	4	0,400
	C. terrificus	—	—
Suero anti *jararaca*	*B. alternata*	3	0,400
	B. neuwiedii	2	0,200
	B. jararacussu	1	0,100
	B. jararaca	4	0,800
	C. terrificus	—	—
Suero anti *jararacussu* .	*B. alternata*	3	0,800
	B. neuwiedi	2	0,400
	B. jararacussu	4	5,000
	B. jararaca	4	4,000
	C. terrificus	2	0,050
Suero anti crotálico	*B. alternata*	—	—
	B. newiedii	1	0,500
	B. jararacussu	—	—
	B. jararaca	—	—
	C. terrificus	3	0,400

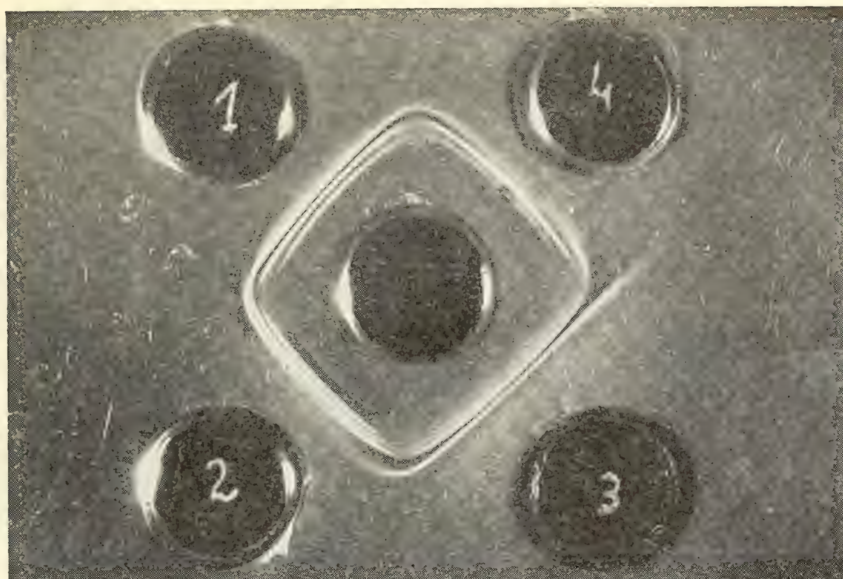


Fig. 1. — Difusión en agar de suero anti-jararaca frente a veneno jararaca a distintas concentraciones: 1) 0,80 mg, 2) 0,50 mg, 3) 0,40 ml, 4) 0,20 mg.

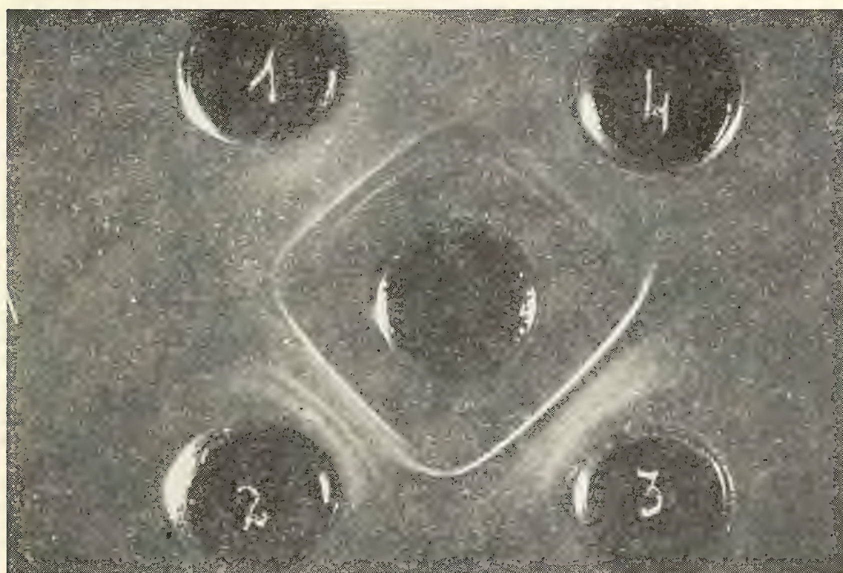


Fig. 2. — Difusión en agar de suero anti-neuwiedii frente a veneno neuwiedii a distintas concentraciones: 1) 2,0 mg, 2) 1,60 mg, 3) 1,30 mg, 4) 1,0 mg.

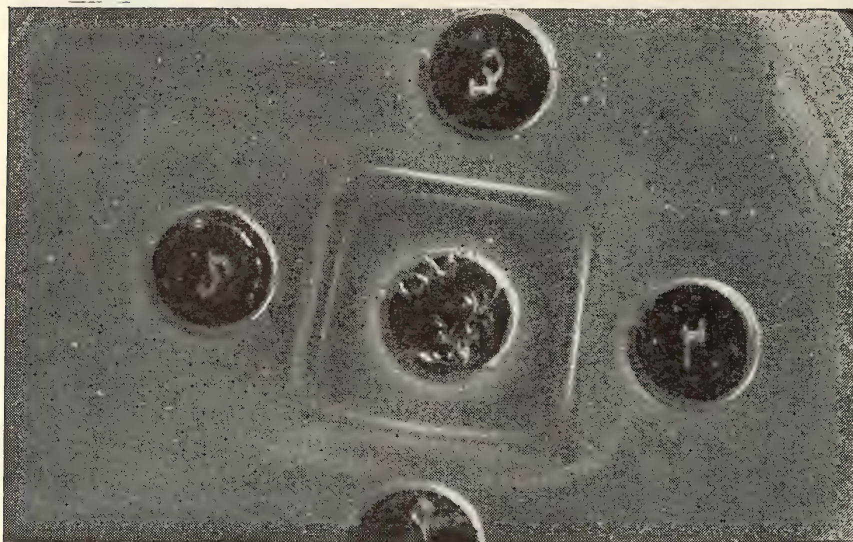


FIG. 3. — Difusión en agar de suero anti-jararacussú frente a veneno jararacussú en concentraciones: 1) 5,0 mg, 2) 4,0 mg, 3) 3,0 mg, 4) 2,0 mg.

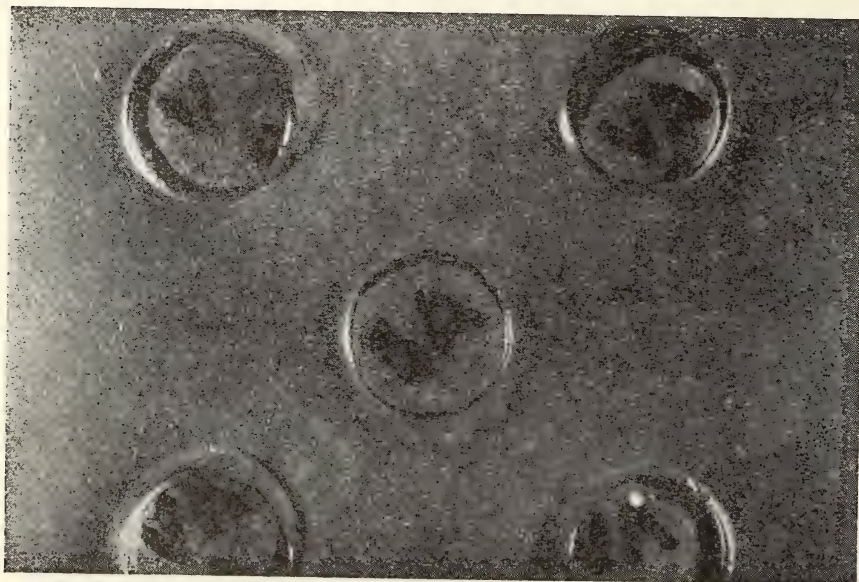


FIG. 4. — Difusión en agar de suero bivalente (anti-alternata y anti-neuwiedii) frente a veneno alternata en concentraciones: 1) 4,0 mg. 2) 3,5 mg, 3) 3,0 mg, 4) 2,5 mg.

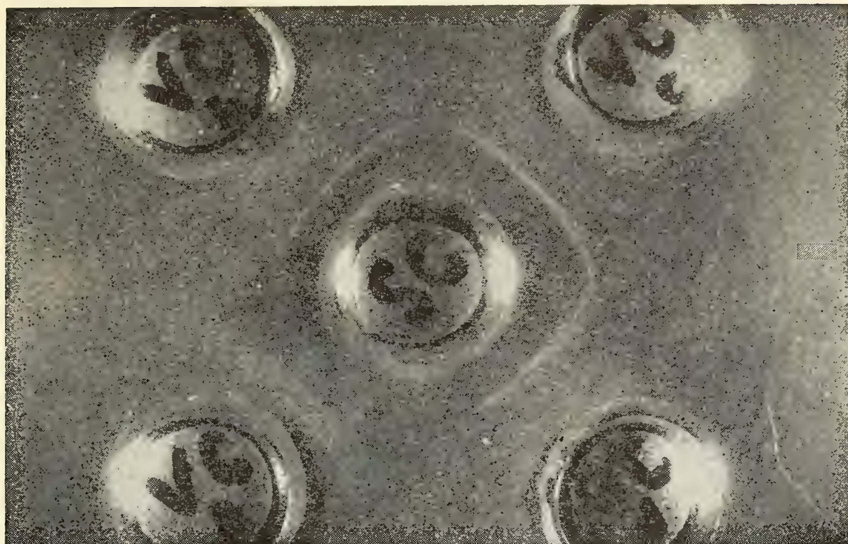


Fig. 5. — Difusión n agar de suero anti-crotálico frente a veneno crotálico frente a veneno crotálico en concentraciones: a) 0,40 mg, b) 0,30 mg, c) 0,20 mg, d) 0,15 mg.

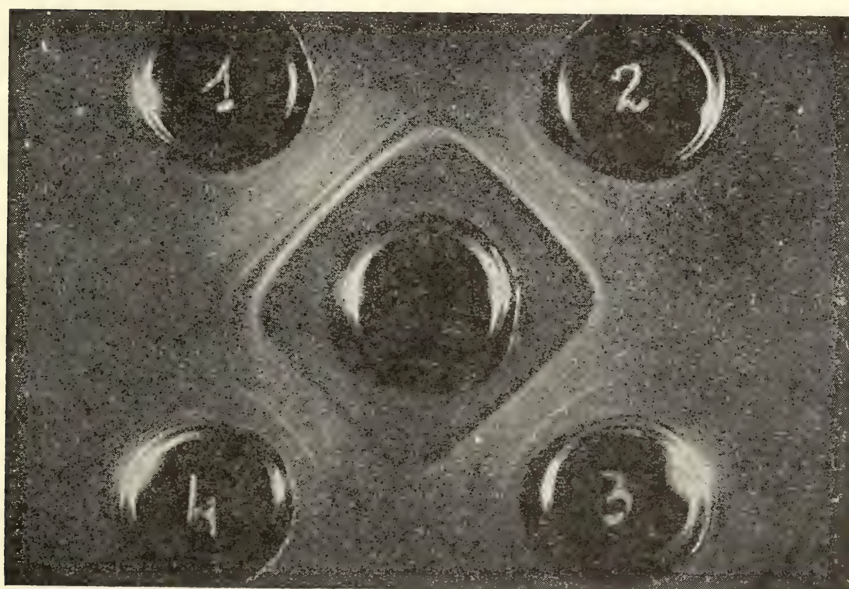


Fig. 6. — Difusión en agar de suero bivalente (anti-alternata y anti-neuwiedii) frente a veneno neuwiedii en concentraciones: 1) 4,0 mg, 2) 3,0 mg, 3) 2,5 mg, 4) 2,0 mg.

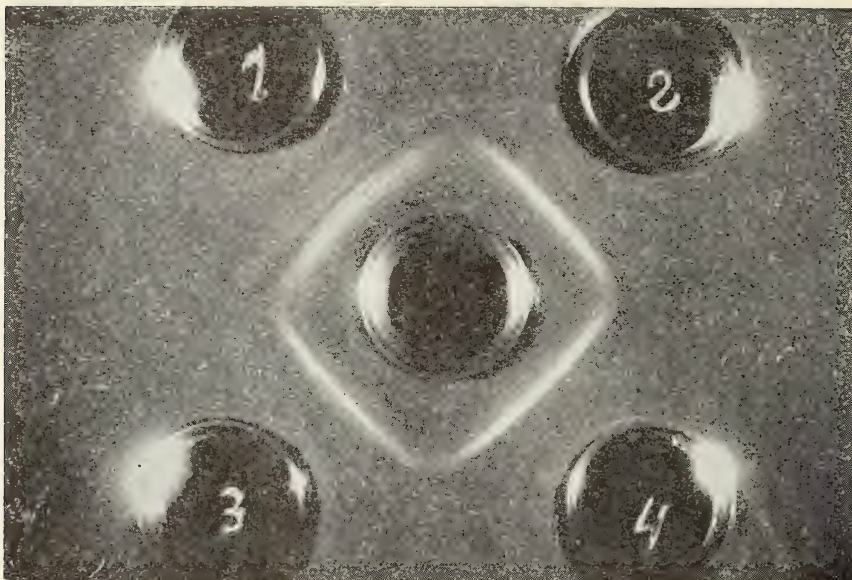


Fig. 7. — Difusión en agar de suero anti-jararacassú frente a veneno alternata en concentraciones: 1) 0,80 mg, 2) 0,60 mg, 3) 0,50 mg, 4) 0,40 mg.

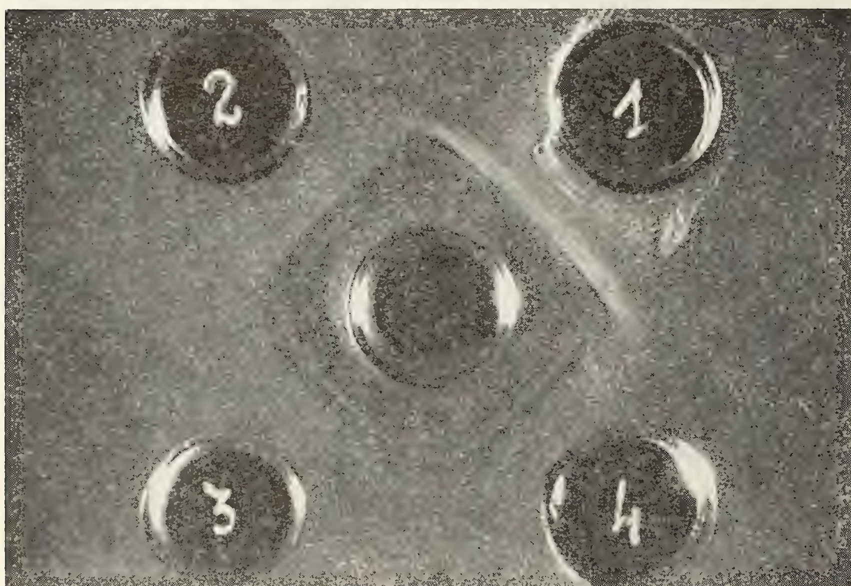


Fig. 8. — Difusión en agar de suero anti-alternata frente a veneno jararaca en concentraciones: 1) 0,60 mg, 2) 0,40 mg, 3) 0,30 mg, 4) 0,20 mg.

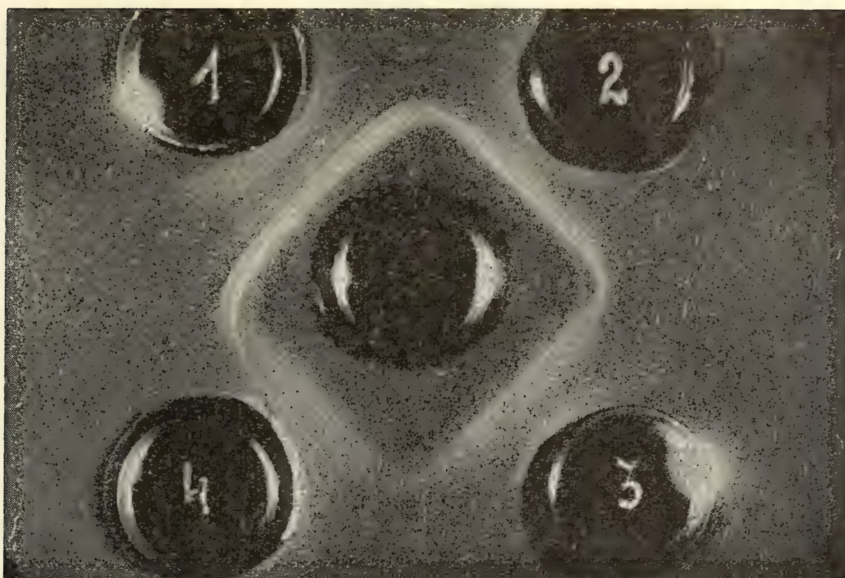


Fig. 9. — Difusión en agar de suero anti-jararacussú frente a veneno jararaca en concentraciones: 1) 4,0 mg, 2) 3,0 mg, 3) 2,5 mg, 4) 2,0 mg.

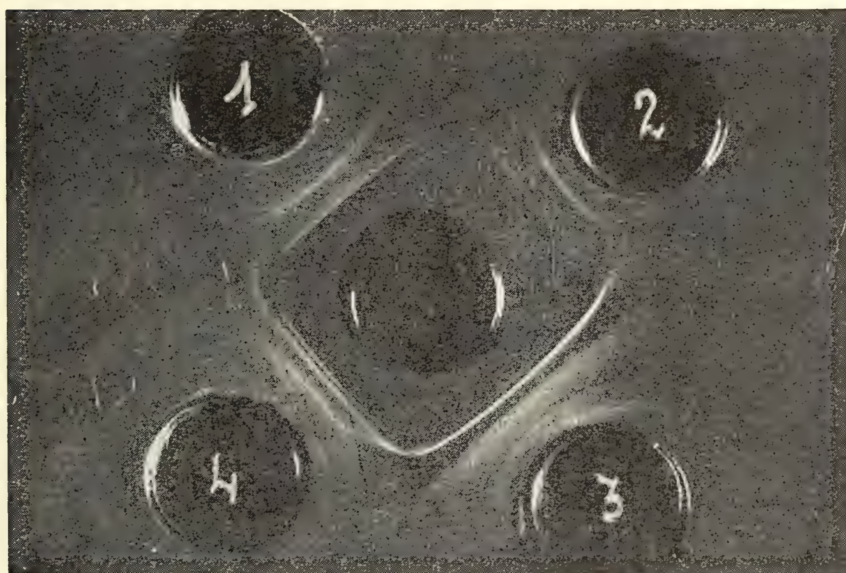


Fig. 10. — Difusión en agar de suero anti-neuwiedii frente a veneno jararaca en concentraciones: 1) 0,50 mg, 2) 0,40 mg, 3) 0,30 mg, 4) 0,20 mg.

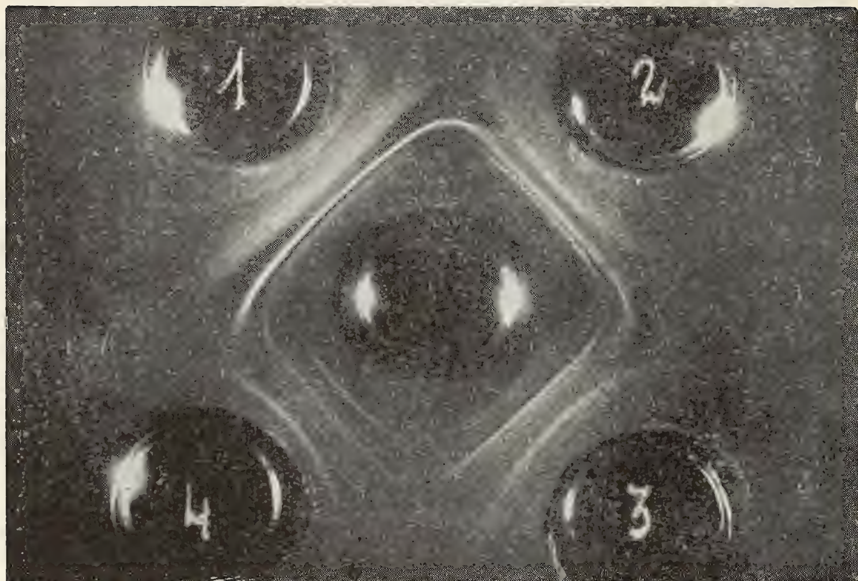


Fig. 11. — Difusión en agar de suero anti-alternata frente a veneno neuwiedii en concentraciones: 1) 1,0 mg, 2) 0,80 mg, 3) 0,60 mg, 4) 0,40 mg.



Fig. 12. — Difusión en agar de suero anti-jararacussú frente a veneno crotálico en concentraciones: 1) 0,05 mg, 2) 0,03 mg, 3) 0,02 mg, 4) 0,01 mg.

4. — Conclusiones

1° — Los sueros frente a venenos homólogos dan un número mayor de líneas de precipitación.

2° — La coincidencia antigénica es notable entre antígenos de géneros relacionados.

3° — En el caso del género *Bothrops* frente a *Crotalus*, y a la inversa, hay algunas bandas de precipitación, pero se interpretan como resultado de impurezas del veneno (secreciones glandulares, etc.).

4° — Hay posibilidad de una coincidencia antigénica no específica (especificidad de órgano, glándulas).

REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

Arthus, M. 1911. — "Venoms and antivenoms". Arch. Intern. Physio, *11*, 356.

Arthus, M. 1911. — Deux expériences destinées a démontrer dans un cours deux caractéres de la réaction des antisenins sur les venins, sa spécificité et son instantanéité. C. R. Soc. Biol. *71*, 235.

Ahuja, M. L., 1935. — Specificity of antivenoms serum. Ind. J. Med. Research, *22*, 479.

Brazil, V. 1898. — "Estudios experimentales de preparados usados contra mordeduras de cobras y otros animales venenosos". Rev. Med. San Paulo, *1*, 139.

Brazil, V. 1901. — "Contribución al estudio del veneno ofídico". Rev. Med. San Paulo, *4*, 255, 296, 375.

Calmette, A. 1907. — "Les Venins". Masson et cie., París.

Grasset, E. 1955. — "Método de ensayo y normalización de antivenenos". Bull. of the World Heath Organization, septiembre.

Houssay, B. A., y Negrete, J. 1921.— "Proportions de neutralisation des venins par les sérum anti-venimeux". C. R. Soc. Biol., *85*, 999.

Kellaway, C. H. 1937. — Bull. John's Hopkins Hosp., *60*, 159.

Oudin. 1948. — "L'analyse Chimique cualitative methode par diffusion des antigens et seur de l'inmuno-serum precipitant gelose". Annales Inst. Pasteur, *75*, 30, 109.

Ouchterlony, O. 1948. — "In vitro method for testing the Toxin-Producing capacity of diphterie bacteria". Acta Path. Microb. Scand., *25*, 187.

Ouchterlony, O. 1949. — "The antigen-antibody reaction in agar". Arkiv för Kemi B. *26*, 1.

Phisalix, C., et Bertrand, G. 1893. — "Recherches sur la toxicité du sang du crapaud commun". Arch. Physiol. Norm. Path., *5*, 511.

Phisal x, C., et Bertrand, G. 1893. — "Sur la presence de glandes venimeuses chez les couleuvres, et la toxicité du sang chez ces animaux". C. R. Ac. Sci., 118, *76*, 1894.

Pope, 1939. — "The action of proteolytic enzymes on the antitoxins and proteins in inmune sera". Brit. J. Exp. Path., *20*, 132.

Recibido, Noviembre de 1961.

ASOCIACION ARGENTINA DE MICROBIOLOGIA

COMUNICACIONES

Reunión del 27 de junio de 1962.

J. J. Monteverde[1]; D. H. Simeone[2], y E. J. Chialvo[3]

Comparación entre dos cepas de virus de la enfermedad de Newcastle en la Argentina.

Se presentan los resultados obtenidos al comparar la Cepa Quilmes del virus de la enfermedad de Newcastle, que por primera vez aislaron los autores cuando demostraron la existencia de la enfermedad en la Argentina (4), con otra cepa aislada en la ciudad de Córdoba, a unos 700 kilómetros del foco inicial, por el Dr. C. M. Bettinotti (5).

La comparación se cumplió realizando pruebas de aglutinación de hematíes de pollo, perro, cabra, vaca, caballo, cobayo, gato, oveja, ratón y humano; efecto sobre embriones de pollo (lesiones micro y macroscópicas DL50 y DI50 en líquido alantoideo de embrión de pollo); efecto citopatogénico en células Hela; actividad infecciosa experimental en pollos de 8 semanas (viremia); actividad sobre pollos inmunizados y recobrados de la infección natural (viremia), actividad sobre ratones lactantes; pruebas de neutralización y de inhibición de la hemaglutinación de hematíes de pollo (método Beta).

Mediante estas pruebas no fue posible establecer características dignas de ser asignadas como diferencias entre las cepas en estudio.

Se hizo saber que el trabajo "in extenso" se publicará y que éste contendrá más detalles para los interesados. Se señalaron algunos hechos que merecían insistencia, y entre ellos se hizo mención de la necesidad de tener información adecuada acerca de los pasajes su-

(1) Profesor Titular de la Cátedra de Microbiología (Escuela de Veterinaria), Facultad de Agronomía y Veterinaria (Universidad de Buenos Aires), y Director del Centro de Enterobacterias.

(2) Profesor Adjunto de la Cátedra de Microbiología de la misma Facultad e integrante del personal de investigaciones del Centro de Enterobacterias.

(3) Auxiliar del Centro de Enterobacterias que funciona en la Cátedra citada.

(4) Monteverde, J. J.; Simeone, D. H.; Rodriruez Leiva, M., y Chialvo, E. J.: "Enfermedad de Newcastle. Su hallazgo en la República Argentina". Rev. Med. Vet., Bs. As., *42*, 6 (1961), 3-36.

(5) Comunicaciones personales del 7/XI/60 y 7/0/62.

fridos por las cepas en prueba para juzgar su poder patógeno ya que, para el caso de los virus aislados en la Argentina, los sucesivos pasajes operaban una rápida disminución de virulencia, remarcándose que los resultados de la hemaglutinación habían vuelto a demostrar que los eritrocitos de caballo y gato no eran afectados, siendo los restantes sensibles en distintos grados.

Se anunció que se estaba en posesión de un virus argentino de la enfermedad de Newcastle suficientemente atenuado y capaz de inducir sólida inmunidad específica.

Este trabajo fue realizado en la Cátedra de Microbiología (Escuela de Veterinaria), Facultad de Agronomía y Veterinaria de Buenos Aires y Centro de Enterobacterias que funciona con fondos suministrados por la Comisión Administradora del Fondo de Promoción de la Tecnología Agropecuaria del Instituto Nacional de Tecnificación Agropecuaria.

Reunión del 27 de junio de 1962.

DR. M. JOSÉ SA FLEITAS (**)

Estudio anatomo-topográfico de mesomembranas vasculares
Estudio anátomo-topográfico de mesomembranas vasculares
Su importancia en virología (*)

RESUMEN Y CONCLUSIONES

El autor, durante su experiencia en cultivo de virus de la parotiditis en aproximadamente 8.000 huevos embrionados de 14 días de edad en el momento de la cosecha del líquido amniótico, pudo observar determinadas características en la disposición de los vasos alantoideos y sus relaciones topográficas con relación a los meridianos de la cáscara, así como la existencia de formaciones membraniformes, con las características de un "meso", constituidas por los vasos en el momento de su alejamiento o reflexión al dirigirse desde la membrana corio-alantoidea hacia el embrión.

Con el fin de precisar la frecuencia estadística de esas características, el autor diseñó su investigación en la siguiente forma:

(*) Trabajo de la Sección Virología de la División Laboratorio de Investigaciones, Departamento Técnico, Dirección General de Sanidad, E. A., Pozos 2045, Buenos Aires, República Argentina.

(**) Jefe de la Sección Virología (D. L. I., D. G. S.).

En partidas parciales de 100 huevos embrionados de 14 días de incubación en posición vertical con movilización bicuotidiana de 50° (7 días a 38,5° C y 7 días a 35° C), efectúa un "sorteo" por medio de "Tablas estadísticas de Números al azar", del 5 % de cada serie. En esa forma reúne un total de 82 observaciones. En cada embrión señala previo a su apertura, el "punto fijo de referencia de Beveridge" (punto en que la primera vena alantoidea adherida a la membrana corioalantoidea se libera de la membrana para dirigirse al embrión), al que denomina punto "cero móvil". Luego procede a abrir y extraer el casquete de cáscara del polo mayor hasta el límite de la cámara de aire y, colocando el huevo en posición horizontal, con el polo abierto de frente al observador, sitúa el "punto cero móvil" de modo que coincida con la "posición de las 12 horas" de un cuadrante de reloj que utiliza de referencia para las sucesivas posiciones de los elementos anatómicos a observar. Este cuadrante de reloj tiene en su centro un orificio que permitió ubicar el huevo en posición horizontal, estando el cuadrante en posición vertical.

El autor, por trabajos de disección y transiluminación (ovoscopía), oportunos, expone los planos anatómicos sucesivos al recoger su observación.

A ese efecto, imprimiendo al huevo un movimiento de rotación en "sentido contrario al movimiento de las agujas del reloj", registra las observaciones en tres posiciones sucesivas del punto de referencia 0° (punto fijo de Beveridge).

1°) Con la "*hora* 12" del cuadrante de referencia; 2°) con la "hora 6" (180° de rotación), y 3°) con la "*hora* 3" (270° de rotación).

A propósito de cada característica topográfica observada en las tres citadas posiciones, el autor presenta en su trabajo dibujos semiesquemáticos, detallados, tablas de Distribución de Frecuencia, gráficos de los respectivos Polígonos de Distribución de Frecuencia y los valores de las tendencias centrales (media aritmética) y de dispersión (Desviación "Standard") de sus observaciones.

Estos destudios permitieron describir las siguientes características:

En posición 0° *del embrión*:

1°) El "Punto de Referencia de Beveridge" se encontró ubicado en la "zona de la cámara de aire" en el 75,6 % de las observaciones, a distancias muy variables, del borde de la citada cámara (parte superior), oscilando entre 0 mm y 30 mm. En el 16,2 % de los embriones esta distancia fué de 8 a 10 mm.

En la "zona de la cáscara", fuera de la cámara de aire, el "punto de referencia 0° móvil", se situó en el 24,4 % de los embriones.

2°) Se pudo observar la presencia de una formación membraniforme que el autor designa como "1ª *meso-membrana vascular*", de forma triangular, cuyo borde libre anterior lo constituye la Primera Vena Alantoidea. Su borde inferior se inserta sucesivamente sobre los sacos amniótico, vitelino y albumen. La extensión de inserción sobre el saco amniótico, ha sido en el 28 % de las observaciones de 12 a 15 mm (oscilando entre 0 a 3 mm (1,2 % de los embriones) y 44 a 47 mm (1,2 % de los embriones).

Se destaca la importancia práctica que puede tener esta inserción en oportunidad a la cosecha del líquido amniótico en cultivos del virus, dado que la maniobra de apertura de la brecha hacia el saco amniótico puede originar fácilmente el desgarramiento de este saco por tironeamiento de la citada mesomembrana, y la pérdida consiguiente de la mayor parte de su líquido.

En la posición de 180°:

Se presentan los "segundos vasos alantoideos" (arteria y vena) que siguen un curso oblicuo, desde el tercio posterior del embrión, transcurriendo hacia la periferia para desaparecer ("punto de extinción") a nivel del punto de la "*hora* 10" del cuadrante de referencia, en el 49,5 % de los embriones, y en la "*hora* 11" en un segundo orden de frecuencia. Estos mismos vasos constituyen el borde anterior de una "*segunda meso-membrana vascular*", existente en un 52,4 % de los huevos observados.

En relación con el cuadrante horario de referencia, la topografía del "punto de extinción" periférico de la primera vena alantoidea, está a nivel de la "*hora* 6" en el 51 % de los huevos examinados.

Los *terceros vasos alantoideos* (vena y arteria) tienen su "punto de extinción periférico" a nivel de la "*hora* 2" en el 48,6 % de los 78 huevos embrionados estudiados.

En la posición 270°:

Los "*puntos de extinción periféricos*" de los *segundos vasos alantoideos* están en la "*hora* 9" en el 62 % de los huevos embrionados, y el de los *terceros vasos alantoideos* en la "*hora* 1" en el 34 % de las observaciones.

En relación al "*punto de referencia fijo de Beveridge*" se ha podido apreciar la relativa variabilidad de su situación con referencia al

plano sagital o meridiano del huevo (75,6 % a nivel de la cámara de aire y 24,4 % a nivel de la zona de la cáscara) en contraste con una mayor constancia de su posición angular dentro de un plano frontal o transversal, en relación con los "puntos topográficos periféricos de extinción" de los segundos y terceros vasos alantoideos, en las posiciones de rotación sucesivas de 180° y 270°.

Esta contribución al conocimiento de la ubicación de los "*puntos de extinción periféricos*" de los vasos alantoideos y de las respectivas meso-membranas, puede tener además una aplicación práctica, al facilitar, mediante su sección previa, la evacuación del paquete embrión-yema, evitándose el arrastre de la membrana corio-alantoidea, circunstancia de interés en varias técnicas de Virología y Parasitología.

Reunión del 29 de agosto de 1962.

DR. ENRIQUE PÉREZ CATÁN [1] y SR. MARIO DI ROCCO [2]

Primer aislamiento efectuado en la República Argentina del "Dermatophilus congolensis" como agente etiológico de la dermitis contagiosa de los lanares (tipo "Lana de palo")

Comunicación previa

RESUMEN

1. De muestras de lana "costrosa" o "lana de palo", mal llamada dermitis micótica al decir de Bugyaki, que correspondería al "lumpy wool" de los autores de habla inglesa, hemos aislado al *Dermatophilus congolensis* por primera vez en la República Argentina.

2. Las cepas aisladas por nosotros han sido homologadas con otras remitidas por el Dr. P. K. C. Austwick, a quien agradecemos su gentil atención y con quien estamos en permanente contacto.

3. Las características culturales tintoriales y fisiológicas de nuestras cepas coinciden con las de procedencia inglesa.

4. Hqmos reproducido la enfermedad experimental en conejos por escarificación en piel con cepas autóctonas y extranjeras, como lo aconsejan Austwick y Ainsworth.

(1) Médico Veterinario a cargo del Laboratorio de Bacterias Aerobias y Micología. Instituto de Patología Animal (I.N.T.A.).

(2) Ayudante Técnico del Laboratorio de Bacterias Aerobias y Micología. Instituto de Patología Animal (I.N.T.A.).

5. Son patógenas para el cobayo, ya sean por vía subcutánea, intraperitoneal e intramuscular. Del triturado de hígados hemos recuperado a la cepa infectante —no en todos los casos—, y en frotis de órganos teñidos hemos observado el hongo en sus formas "cocoideas" y de "mora".

6. De acuerdo con Buyacki creemos conveniente designar a esta enfermedad como "dermitis contagiosa".

7. Si bien —y de acuerdo con nuestra experiencia— no dudamos del papel etiológico del *Dermatophilus congolensis* respecto de la Dermitis contagiosa, queremos dejar constancia que —de acuerdo a nuestros estudios sobre el particular— otros hongos determinan dermitis similares a la vez que actúan como depredadores de la lana en los animales vivos, y con los cuales hemos reproducido lesiones experimentales típicas en conejos, trabajos que daremos a conocer más adelante.

6. Summary

1. From samples of "costrosa" or "lana de palo", wool, wrongly refered as dermitis micotica, as said by Bugyaki, and accordling with the english speaking authors would be "lumpy wool" has been isolated *Dermatophilus congolensis* for the first time in Argentine.

2. The strains isolated has been homologate with others sent by P. K. C. Austwick to whom we are very grateful and he is permanent contact with us.

3. The cultural, dyeing and phisiological characteristics of our strains are coincident with those of british origin.

4. The disease has been reproduced experimentally on rabbits by scarification on skin with native and foreign strans, as advised by Austwick and Aissworth.

5. They are pathogenic to the guinea pig either by subcuraneous, intramuscular or intraperitoneal via. From triturated liver has been recovered the infectant strain, but not in every case, and of frontis of staining organs has been observed on fungus in their "cocoideas" and "mora" forms.

6. According to Bugyaki is believed desirable to designate this desease as "dermitis contagious'.

7. While, and according with the experiences obtained, there's not doubt as to the etiological role of the *Dermatophilus congolensis* with respect to dermatitis contagious, is stablished that, according with studies on this particular, other fungus cause dermitis similar while

acting as wool depredators on live animals, on which we have reproduced the experimental lesions typical on rabbits. This paper be reported further on.

Reunión del 17 de octubre de 1962.

R. A. Margni, J. C. López, A Garyuli y J. Casaglia

Purificación de toxoide tetánico

Se ha efectuado un estudio analítico de los métodos más comúnmente empleados para la purificación y concentración de toxoide tetánico, incluyendo algunas variantes y determinando cuál es la que da productos más puros y mayor rendimiento.

Se partió de dos toxoides diferentes, uno obtenido en medio de Prevot de 8 Lf/ml y otro en medio de Taylor y de 9 Lf/ml. Todos los ensayos descriptos a continuación fueron hechos con ambos toxoides. En todos los casos las relaciones de concentración entre productos finales e inicial fue de 15:1.

A — El toxoide se precipita a pH 4,75, a — 10° C y en presencia de 40 % de etanol por 4 horas. Se dializa y filtra. Se divide en tres porciones A , A_1 y A_3.

A — Se concentra a vacío a 40° C.

A_1 — Se precipita con sulfato de amonio a saturación. El precipitado se dializa y completa a volumen.

A_3 — Segunda precipitación alcohólica igual a *A*.

B — Precipitación con sulfato de amonio a saturación. Se filtra por papel y dializa dividiendo en tres porciones B_1, B_2 y B_3.

B — Concentración a vacío a 40° C.

B_1 — Se decolora con carbón a pH 6 (H_2SO_4) y concentra a vacío a 40° C.

B_3 — Se precipita a pH 4,75, a — 10° C y en presencia de alcohol a 40 %.

C — Se precipita el toxoide con sulfato de amonio a saturación. El precipitado se disuelve en agua y divide en dos porciones C y C_1.

C — Se precipita a pH 4,75 a — 10° C en presencia de 40 % de etanol.

C_1 — Se precipita nuevamente con sulfato de amonio a saturación, filtra y dializa.

D — Se precipita el toxoide con sulfato de amonio a saturación, se filtra y el filtrado se satura con sulfato amónico.

El precipitado se dializa.

Conclusiones

1) Los métodos que dan mejores resultados son los de doble precipitación alcohólica y el de precipitación con sulfato amónico al 20 % y a saturación.

2) Este último procedimiento tiene la ventaja de dar para la misma pureza rendimientos en un 30 % superiores, y además todas las operaciones se hacen a temperatura ambiente.

Reunión del 7 de diciembre de 1962.

B. L. Morán (1) ; J. J. Monteverde (2) ; D. H. Simeone (3) ; E. J. Chialvo (4) y J Garbini (5).

Enfermedad de Newcastle.

Histopatología de materiales procedentes de infección natural y experimental (*).

Se presentan los resultados del estudio anatomopatológico, tanto macroscópico como microscópico de las lesiones producidas por la enfermedad de Newcastle comprobada por primera vez en la Argentina y se comparan con las lesiones histopatológicas estudiadas por otros autores extranjeros.

(*) Trabajo realizado en las Cátedras de Anatomía Patológica y Microbiología de la Escuela de Veterinaria de la Facultad de Agronomía y Veterinaria de Buenos Aires (1961-1962).

(1) Profesor Titular de Anatomía y Fisiología Patológicas (Escuela de Veterinaria), Facultad de Agronomía y Veterinaria. Buenos Aires.

(2) Profesor Titular de Microbiología (Escuela de Veterinaria), Facultad de Agronomía y Veterinaria de Buenos Aires, y Director del Centro de Enterobacterias.

(3) Profesor Adjunto de la Cátedra de Microbiología de la misma Facultad e integrante del personal de investigaciones del Centro de Enterobacterias.

(4) Auxiliar del Centro de Enterobacterias que funciona en la Cátedra citada.

(5) Personal contratado en la Cátedra de Anatomía y Fisiología Patológica (Escuela de Veterinaria), Facultad de Agronomía y Veterinaria de Buenos Aires.

Los materiales estudiados, procedentes de la enfermedad natural y experimental, consistieron en órganos del aparato respiratorio, hemolinfático, digestivo, génito-urinario y sistema nervioso de aves adultas, pollos y embriones de pollo.

Se presentan los cortes histopatológicos realizados con dichos materiales, describiéndose las lesiones en los diversos órganos.

Se hacen consideraciones acerca de las lesiones observadas y su relación con los síntomas de la enfermedad en la Argentina.

Se menciona que los datos aportados por esta investigación indican que las más importantes lesiones del virus de la enfermedad de Newcastle, en los casos estudiados, radican en el S. N. C., y no en el aparato respiratorio, lo que explica la sintomatología observada en los focos comprobados.

Se cita el efecto citopatogénico del virus de la enfermedad de N. C. en células Hela y la infructuosidad para comprobar cuerpos de inclusión con diversas técnicas de coloración.

Se hace saber que el trabajo "in extenso" se publicará con los detalles para los interesados.

